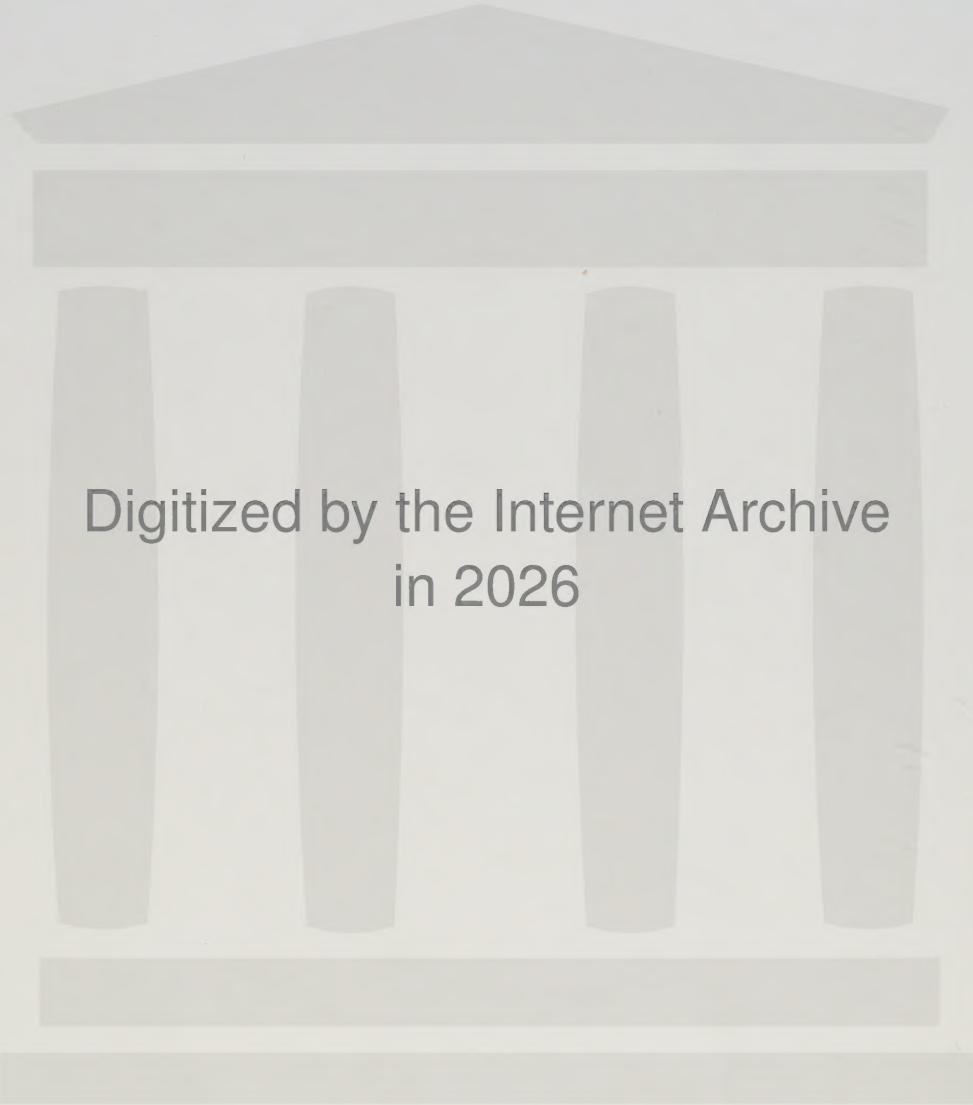


A. R. Degheidy

Frankfurt 1979



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550809_0015

EIN DREIZENTRENSCHALENMODELL

FÜR

DREIFACHSPALTUNG

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik der

Johann Wolfgang Goethe-Universität

in Frankfurt am Main

Abdel Razik D e g h e i d y

aus

Dakahlia/Ägypten

Frankfurt am Main

Dezember 1978



Gedruckt mit Genehmigung der Naturwissenschaftlichen
Fakultät der Universität Frankfurt/Main

Dekan:	Prof. Dr. D. Wolf
Leiter der Arbeit:	Prof. Dr. W. Greiner
Erstgutachter:	Prof. Dr. W. Greiner
Zweitgutachter:	Prof. Dr. J. Maruhn

Tag der mündlichen Prüfung 18. Mai 1979

Abstract:

We propose a generalisation of the phenomenological shell model based on the harmonic oscillator potential with spin-orbit term and L^2 -corrections to systems made up of three clusters. The Centers of these may be in arbitrary geometrical configurations and the clusters may be of different masses. The method of determining the eigenstates of the single-particle Hamiltonian is sketched and results for the cluster structure of light nuclei and the ternary fission of a superheavy system are presented.

INHALTSVERZEICHNIS

=====

	<u>Seite</u>
I. Einleitung	1
II. Das Dreizentrenoszillatorschalenmodell	7
1) Der Dreizentrenoszillator ohne L_S und L^2 -Term	7
Berechnung des Skalarproducts	13
Berechnung der Matrixelemente von H_0	15
Matrixelemente der kinetischen Energie	15
Matrixelemente des Potentials	16
2) Erweiterung des Dreizentrenoszillator- schalenmodells	19
Matrixelemente von V_{LS}	23
Matrixelemente von V_L^2	27
III. Volumenerhaltung	32
IV. Diskussion der Ergebnisse	41
V. Zusammenfassung und Ausblick	50
 <u>Anhänge</u>	
A) Behandlung des Eigenwertproblems in nicht- orthogonaler Basis ;	51
B) Berechnung von $\hat{A} \phi\rangle$	54
C) Berechnung der Matrixelemente $\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i C_1 n_x, n_y, n_z, j \rangle$	62
D) Integrale zur Volumenerhaltung	69
Literaturverzeichnis	75
Beschreibung der Abbildungen	78
Die Ergebnisse	85

I. Einleitung

Seit der Entdeckung der Kernspaltung 1938 von Hahn und Straßmann (1) ist eine Reihe von Modellen zu ihrer Erklärung untersucht worden. Das Älteste dieser Modelle ist das Tropfenmodell von Bohr und Wheeler (2). Dieses Modell konnte jedoch weder deformierte Grundzustände noch die asymmetrische Spaltung vieler schwerer Kerne erklären. Das legte die Vermutung nahe, daß Schaleneffekte eine wichtige Rolle spielen.

Das Schalenmodell nach Nilsson (3) hatte großen Erfolg in der Beschreibung von Kernzuständen bei kleinen Deformationen. Es war jedoch nicht in der Lage, stark deformierte Zustände zu beschreiben, wie sie in der Spaltung auftreten können, insbesondere an der Spaltbarriere sowie, den Grenzfall zweier getrennter Fragmente.

Um die Kernspaltung in zwei Fragmente asymptotisch richtig beschreiben zu können, lag es nahe, zwei nebeneinander liegende Nilsson-Oszillatoren zu betrachten. Merzbacher (4) hatte bereits die Schrödinger-Gleichung für ein solches Potential im eindimensionalen Fall gelöst. Aber erst durch die Arbeiten von Cherdantsev und Marshalkin (5), Demeur und Reidemeister (6), Holzer und Greiner (7) wurde die Beschreibung der Kernspaltung mit einem Modell dieser Art möglich.

Holzer und Greiner betrachteten zwei Oszillatoren, die sich auf einer gemeinsamen Achse befanden und gegenseitig durchdringen konnten. Die Nukleonen waren hier nicht fest an ein Zentrum gebunden, sondern konnten zwischen den beiden Zentren umherwandern. In den folgenden Jahren wurde dieses einfache Zweizentrenoszillatorschalenmodell erweitert. Scharnweber (8,9) fügte zum symmetrischen Zweizentrenoszillator den Spin-Bahn-Kopplungsterm sowie den L^2 -Term hinzu und untersuchte verschiedene Vorschriften zur Volumen-

erhaltung. Maruhn (10 - 12) erweiterte das Modell auf die asymmetrische Kernspaltung und studierte die Dynamik einer neuartigen Kollektivkoordinate $\eta = (A_1 - A_2) / (A_1 + A_2)$, mit deren Hilfe es erstmals möglich war, Massenverteilungen, wie sie in der Spaltung auftreten, theoretisch zu berechnen. A_1, A_2 bedeuten die Massenzahlen der Fragmente.

Das Zweizentrenoszillatorschalenmodell wurde nicht nur in der Spaltung angewandt, sondern auch zur Beschreibung von Prozessen in der Schwerionenstreuung wie Nukleonentransfer, Clustertransfer, Kernmolekülen sowie der Fusion schwerer Kerne und in der Atomphysik. Seine Nützlichkeit hat sich inzwischen in zahlreichen Arbeiten erwiesen.

Bereits 1941 wies Present (13) darauf hin, daß die Spaltung eines schweren Kerns in mehr als zwei Fragmente nach dem Flüssigkeitstropfenmodell nicht unmöglich sei.

Das Aufbrechen eines Kerns in drei etwa gleich schwere Bruchstücke wurde als ternäre Kernspaltung oder Kerndreier-spaltung bezeichnet. Swiatecki (14) berechnete in diesem Modell die Energie, die beim Zerfall eines Kerns in n gleich schwere und vollständig getrennte Fragmente frei wird (Abb. 1). Es zeigte sich, daß im Bereich der Elemente ${}_{83}\text{Bi}$ bis ${}_{100}\text{Fm}$ ($30.5 < \frac{Z}{A} < 43.3$) die Dreifachspaltung die energetisch günstigste Fragmentation ist. Diese energetischen Überlegungen lassen allerdings keine Aussage über die Höhe der Spaltbarriere zu.

Erste experimentelle Hinweise auf Dreifachspaltung bei spontaner oder durch thermische Neutronen induzierter Spaltung gab es bereits 1947 (15). Aber erst in den letzten Jahren konnte die Dreifachspaltung durch Verwendung von Projektilen mittlerer und hoher Energie eindeutig nachgewiesen werden. Eine Zusammenfassung der Experimente zur Dreifachspaltung finden wir bei Brandt (16) und Halpern (17).

Iyer und Cobble (18,19) bestrahlten Uran mit α -Teilchen und bestimmten radiochemisch den Wirkungsquerschnitt für die Produktion leichter Fragmente wie ^{24}Na , ^{28}Mg und ^{38}S . In Abb. (2) sehen wir die Anregungsfunktion für die Produktion der genannten Nuklide. Die gemessenen Wirkungsquerschnitte von $\sigma \approx 10^{-23} \text{ cm}^2$ sind außerordentlich klein. Abb. (3) zeigt die Spaltprodukt-Massenverteilungen für die Reaktion $^{238}\text{U} + ^4\text{He}$ (39 MeV). Da die ganz leichten Fragmente ($20 < A < 60$) erheblich stärker gebildet werden als die ganz schweren Fragmente ($A \approx 200$) ist klar, daß die leichten Fragmente nicht aus einer stark asymmetrischen binären Kernspaltung stammen. Die Produktion der ganz leichten Fragmente wie ^{28}Mg ist somit ein Beweis für die ternäre Kernspaltung in der o.a. Reaktion.

Die Untersuchung der mit schweren Ionen induzierten Kern-dreierspaltung geschieht im allgemeinen durch folgende Experimente: Zählerexperimente und Glimmerexperimente.

Glimmer ist ein Detektor für Spaltprodukte mit einer Masse $A \gg 30$. Die Spuren der Spaltprodukte können durch Ätzen mit Flußsäure sichtbar gemacht und anschließend unter einem Mikroskop betrachtet werden. Abb. (4) zeigt das Verhältnis von Dreifachspaltung $\sigma'(T)$ zu Zweifachspaltung $\sigma'(B)$ als Funktion der Einschußenergie von ^{40}Ar -Ionen auf verschiedene schwere Targets wie Au, Pb, Bi, Th und U, gemessen mit 2π bzw. 4π -Geometrie. Das Verhältnis $\sigma'(T)/\sigma'(B)$ wächst mit zunehmender Energie des Projektils und bei konstanter Projektil-Energie mit Z^2/A des Compoundkerns an. (20)

$$\sigma'(T)/\sigma'(B) \leq 3 \%$$

Dieser maximale Wert wurde von Fleischer, Price, Walker und Hubbard (21) für die Reaktion $\text{Th} + 414\text{-Mev-Ar}$ unter 4π -Geometrie gemessen. Alle diese Experimente geben jedoch

keine Auskunft über die Art des Aufbruchs in drei schwere Fragmente.

Im wesentlichen wird es für den Kern drei Möglichkeiten geben, in drei Bruchstücke zu zerfallen (Abb. 5):

- Kaskadenspaltung, wobei der Kern zunächst stark asymmetrisch spaltet und das schwere Fragment genug Anregungsenergie besitzt, um erneut spalten zu können,
- direkte prolate Dreifachspaltung,
- direkte oblate Dreifachspaltung.

Mit den oben geschilderten Experimenten ist es nicht möglich, zwischen den drei verschiedenen Spaltmoden zu unterscheiden. Die Kaskadenspaltung stellt einen Zwei-Stufen-Prozeß dar, der im Rahmen der binären Spaltung behandelt werden sollte und deshalb hier nicht weiter verfolgt wird.

Eine Spaltung über eine oblate bzw. prolate Sattelpunktkonfiguration entspräche einem direkten Prozeß. Bei der Untersuchung der Potentialenergiefläche superschwerer Kerne mit einem Einzentrenschalenmodell stellte sich heraus, daß die Potentialenergiefläche in Richtung der oblaten Achse weicher war als in prolater Richtung (22). Da das Einzentrenschalenmodell jedoch nur für kleine Deformationen gültig ist, war nicht klar, ob der superschwere Kern nun direkt prolat oder oblat spaltet.

Um diese Frage klären zu können, mußte ein Modell entwickelt werden, das die Berechnung der Potentialenergiefläche vom Grundzustand bis zum Zerreißpunkt erlaubte: ein Dreizentrenoszillatorschalenmodell mit einem entsprechenden Tropfenmodell zur Renormierung nach Strutinsky.

Der Erfolg des Zweizentrenoszillatorschalenmodells ermutigte, dieses Konzept auch auf den Zerfall eines Kerns in mehr als zwei Fragmente anzuwenden.

Diehl (23) entwickelte zunächst ein Tropfenmodell für prolate und oblate Dreifachspaltung. Dabei zeigte sich, daß die Barrierenhöhen für prolate Dreifachspaltung durchweg niedriger sind als für oblate Dreifachspaltung (Abb. 6). Scheefer (24) und Bergmann (25) entwickelten ein Schalenmodell, das aus drei Oszillatoren bestand, die sich auf einer gemeinsamen Achse befanden. Lustig (26) erweiterte dieses einfache Dreizentrenoszillatorschalenmodell, in dem er die Barriere zwischen den Oszillatoren abrundete und den L_s - und L^2 -Term zum Potential hinzufügte. Damit konnte er die Spaltung eines Kerns vom Compoundkern über einen prolat deformierten Zwischenzustand bis zu einer Kette aus drei getrennten Fragmenten durch einen stetigen Übergang beschreiben. Hahn (27) wandte dieses Modell auf die Spaltung schwerer Kerne an, die von der Emission eines leichten, geladenen Teilchens begleitet wird, was meistens ein α -Teilchen ist.

Um den Einfluß von Schalenkorrekturen beim Aufbruch in drei Fragmente studieren zu können, wird in dieser Arbeit ein Dreizentrenoszillatorschalenmodell entwickelt.

Da sich in unserem Modell die drei Zentren in eine Ebene in beliebiger geometrischer Anordnung befinden können, ist eine Vielfalt von Clusterkonfigurationen möglich. Die Fragmente sind jedoch auf sphärische Kernformen beschränkt. Da die Zentren der Oszillatoren nicht notwendigerweise auf einer Geraden liegen müssen, ergibt sich der prolate Aufbruch in drei Fragmente, die eine Kette bilden, als Spezialfall.

Der Hamiltonoperator des Modells hat die Form

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + V_{L_s}(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) + V_{L^2}(\vec{r}, \vec{p}) \quad (1)$$

$$\text{mit } V(\vec{r}) = \frac{1}{2} m \cdot \begin{cases} \omega_1^2 [(x-a_1)^2 + (y-b_1)^2 + z^2] & , \text{Bereich 1} \\ \omega_2^2 [(x-a_2)^2 + (y-b_2)^2 + z^2] & , \text{Bereich 2} \\ \omega_3^2 [(x-a_3)^2 + (y-b_3)^2 + z^2] & , \text{Bereich 3} \end{cases} \quad (2)$$

(a_l, b_l) sind die x-y Koordinaten des l-ten Zentrums, $l = 1, 2, 3$ wobei l die Nummer des Bereiches ist. Die Definition der Bereiche und die Darstellung der (a_l, b_l) finden wir in Tabelle 3.

$$V_{Ls}(\vec{r}, \vec{p}, \hat{s}) = - \frac{2\hbar K_e}{m \omega_e} \cdot [\nabla V \times \vec{p}] \cdot \vec{S} \quad (3)$$

$$V_{L^2}(\vec{r}, \vec{p}) = - \frac{\hbar K_e \mu_e}{m^2 \omega_e^3} [\nabla V \times \vec{p}]^2 + \frac{1}{2} \hbar \omega_e K_e \mu_e N(N+3) \delta_{ff} \quad (4)$$

Der Hamiltonoperator (I.1) wird in einer nichtorthogonalen Basis diagonalisiert, deren Wellenfunktionen um die Zentren herum lokalisiert sind.

Wir werden unser Modell zunächst auf Clusterstrukturen leichter Kerne anwenden und danach die Dreifachspaltung schwerer Systeme untersuchen.

II. Das Drei-Zentren-Oszillator-Schalenmodell

In diesem Kapitel wird ein asymmetrisches Dreizentrenoszillatorschalenmodell mit L.S Kopplung und L^2 -Term entwickelt, das eine Vielfalt von Konfigurationen aus drei Fragmenten beschreibt, in die ein Kern zerfallen kann (siehe Abb. (7), (8))

1) Der Drei-Zentren-Oszillator ohne L.S- und L^2 -Term

Wir betrachten folgendes einfache Modell: Drei verschiedene Oszillatoren, deren Zentren sich in der X-Y Ebene befinden, durchdringen sich gegenseitig (siehe Abb.(9)). Die X-Y Ebene wird durch drei Geraden in drei verschiedene Bereiche geteilt. In jedem Bereich ist das Potential von der Form:

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2} m \omega_l^2 [(x-a_l)^2 + (y-b_l)^2 + z^2] , \quad l = 1, 2, 3 \quad (1)$$

l gibt die Nummer des Bereiches an.

(a_l, b_l) sind die X-Y Koordinaten des Zentrums des l-ten Oszillators und ω_l seine Kreisfrequenz; m ist die Masse des Neukleons. Die Definition der Bereiche und die Darstellung der (a_l, b_l) finden wir in Tabelle 3.

Im asymmetrischen Fall, wo die Fragmente nicht alle gleich sind, ist das Potential zwischen den Zentren zweier Oszillatoren, deren Frequenzen verschieden sind, unstetig. Die Unstetigkeit des Potentials hat jedoch auf das Verhalten quantenmechanischer Wellenfunktionen nur geringen Einfluß, so daß wir diesen Effekt vernachlässigen.

Der Hamiltonoperator des Dreizentrenoszillators (ohne L.S und L^2 -Term) lautet:

$$H_0 = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (2)$$

$$\text{mit } V(\vec{r}) = \frac{1}{2} m \cdot \begin{cases} \omega_1^2 [(x-a_1)^2 + (y-b_1)^2 + z^2] & , \text{Bereich 1} \\ \omega_2^2 [(x-a_2)^2 + (y-b_2)^2 + z^2] & , \text{Bereich 2} \\ \omega_3^2 [(x-a_3)^2 + (y-b_3)^2 + z^2] & , \text{Bereich 3} \end{cases} \quad (3)$$

ω_1 hängt von der Massenzahl der Fragmente ab. Die Massenzahl jedes Fragmentes erhält man durch Ergänzung zu einer vollen Kugel und durch die Beziehung zwischen dem Kernvolumen mit den Massenzahlen A_1 ,

$$\tilde{A}_1 = \left(\frac{\omega_0}{\omega_\ell} \right)^3 (A_1 + A_2 + A_3) \quad 1 = 1, 2, 3 \quad (4)$$

Diese Beziehung gibt die beiden Grenzfälle $\tilde{A}_1 = A_1 + A_2 + A_3$ des sphärischen Compoundkerns und $\tilde{A}_1 = A_1$ der getrennten Fragmente wieder.

ω_0 ist die Oszillatorfrequenz des sphärischen Compoundkerns und durch

$$\hbar \omega_0 = 41 \text{ Mev} \cdot (A_1 + A_2 + A_3)^{-\frac{1}{3}} \quad (5)$$

gegeben.

Durch die Transformation $\vec{r} = \sqrt{m \omega_1 / \hbar} \vec{r}$ auf dimensionslose Koordinaten erhalten wir

$$\frac{1}{\hbar \omega_1} H_0 = \frac{1}{2} [-\Delta + V(\vec{r})] \quad (6)$$

ω_1 ist die Frequenz des Oszillators im Bereich (1) und das Potential $V(\vec{r})$ schreibt sich wie folgt:

$$V(\vec{r}) = \rho_\ell^2 [(x-a_\ell)^2 + (y-b_\ell)^2 + z^2] \quad (7)$$

gibt das Frequenzverhältnis zwischen ω_1 und ω_ℓ an:

$$\rho_\ell = \frac{\omega_\ell}{\omega_1} \quad , \quad 1 = 1, 2, 3 \quad (8)$$

ω_1 wird durch die Forderung der Oberflächenvolumenerhaltung bestimmt. (siehe Kapitel III)

Die Schrödinger-Gleichung lautet in dimensionslosen Koordinaten:

$$\frac{1}{2} [-\Delta + V(\vec{r})] \Psi = \varepsilon \Psi \quad (9)$$

$\varepsilon = E_0/\hbar\omega_1$ sind die Eigenwerte des Dreizentrenoszillators. Eine analytische Lösung der Schrödinger-Gleichung (9) ist wegen der komplizierten Randbedingungen leider unmöglich. Deshalb wird der Hamiltonoperator numerisch diagonalisiert.

Im symmetrischen Fall (Abb. 10), wo die Frequenzen ω_1 bzw. Frequenzverhältnisse ρ_l , $l = 1, 2, 3$ in den drei verschiedenen Bereichen gleich sind - drei gleiche Fragmente - , schreibt sich die Schrödinger-Gleichung (9) in dimensionslosen Koordinaten wie folgt:

$$\frac{1}{2} [-\Delta + \{(x-a_l)^2 + (y-b_l)^2 + z^2\}] \Psi = \varepsilon \Psi \quad (10)$$

Mit dem Ansatz

$$\Psi = \psi(x, y) \chi(z) \quad (11)$$

läßt sich (10) in (x,y)- und z-Richtung separieren, und wir erhalten folgende Differentialgleichungen:

$$\frac{1}{2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + (x-a_l)^2 + (y-b_l)^2 \right] \psi(x, y) = \lambda \psi(x, y) \quad (12)$$

$$\frac{1}{2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2 \right] \chi(z) = (\varepsilon - \lambda) \chi(z) \quad (13)$$

Die Differentialgleichung in Z-Richtung ist für jeden Bereich nichts anderes als die Differentialgleichung des eindimensionalen harmonischen Oszillators mit positiv ganzzahligen Quantenzahlen n_z , $n_z = 0, 1, 2, \dots$

Deshalb ist

$$\xi - \lambda = n_z + \frac{1}{2} \quad (14)$$

Damit ist das Problem auf die Diagonalisation der Eigenwertgleichung (12) reduziert. λ ist der Eigenwert in (x,y)-Richtung und läßt sich wie folgt schreiben:

$$\lambda = (n_x + n_y + 1) \quad (15)$$

Die Eigenwerte λ sind in den Abb. (11), (12), (13) als Funktion des Zentrenabstandes a dargestellt.

Zur Diagonalisierung sucht man eine physikalisch sinnvolle Basis, die eine einfache Form besitzt und die Behandlung der verschiedenen Potentialformen bei guter Konvergenz gestattet.

Für unser Modell sind dies die hermiteschen Polynome (24, 25, 30).

$$|n_x, n_y, n_z, j\rangle = |n_x, j\rangle |n_y, j\rangle |n_z, j\rangle \quad (16)$$

$|n, j\rangle$ sind die Einteilchen-Wellenfunktionen des eindimensionalen Oszillators im Zentrum (j) mit der Quantenzahl (n)

In x-Richtung lautet die Wellenfunktion

$$|n_x, j\rangle = e^{-\frac{1}{2} \rho_j (x-a_j)^2} H_{n_x}^{(x)} [\sqrt{\rho_j} (x-a_j)] \quad (17)$$

a_j ist die x-Koordinate des Zentrums (j),

$H_{n_x}^{(x)}(x)$ ist ein Hermit-Polynom der Ordnung n_x .

Wir konstruieren unsere Basis aus Funktionen dieser Funktionen

menge, die um die drei Zentren herum lokalisiert sind. Asymptotisch liefert dies für den Fall drei getrennter Fragmente richtige Wellenfunktionen

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_x n_y n_z} C_{n_x n_y n_z}^j |n_x, n_y, n_z, j\rangle \quad (18)$$

Wir nennen diese Wellenfunktionen lokale Wellenfunktionen oder Cluster Wellenfunktionen in Analogie zu den atomaren Wellenfunktionen der Atom- und Molekülphysik. Die lokalen Wellenfunktionen jedes Oszillators sind untereinander orthogonal, nicht jedoch die verschiedenen Oszillatoren.

$$\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | n_x, n_y, n_z, j \rangle \neq 0 \text{ für } i \neq j \quad (19)$$

Diese Basis sind übervollständig, wenn die drei Zentren zusammenfallen. Deshalb ist diese Basis zur weiteren Behandlung nicht unmittelbar geeignet. Anstatt nun eine orthonormale Basis zu konstruieren (30), bleiben wir in dieser nicht-orthogonalen Basis und lösen das verallgemeinerte Eigenwertproblem wie in (24), indem wir zunächst die Überlappmatrix diagonalisieren und danach das entsprechend transformierte Problem.

Auf Grund der Übervollständigkeit der Basis erhalten wir für die Eigenwerte der Überlappmatrix $\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | n_x, n_y, n_z, j \rangle$ Werte, die in der Gegend von Eins bzw. von Null liegen. Zur Berechnung der Eigenzustände werden die letzteren Eigenvektoren weggelassen.

Durch die Verwendung der nichtorthogonalen Basis können wir die Matrixelemente direkt durch die lokalen Wellenfunktionen ausdrücken und das zeitlich aufwendige Orthonormalisieren vermeiden. Die o.a. Methode zur Lösung des verallgemeinerten Eigenwertproblems ist in (24) und in Anhang (A) näher erläutert.

Die Eigenwerte des Dreizentrenoszillators ohne L.S- und L^2 -Term sind die Lösungen der folgenden Eigenwertgleichung.

$$\| \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | H_0 | n_x, n_y, n_z, j \rangle - \xi \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | n_x, n_y, n_z, j \rangle \| = 0 \quad (2)$$

mit

$$H_0 = \frac{1}{2} [-\Delta + v(\vec{r})] \quad \text{und} \quad \xi = \frac{E_0}{\hbar \omega_1}, \quad (21)$$

wobei E_0 die Energieeigenwerte sind.

Um die Eigenwerte ξ zu erhalten, müssen wir zunächst die Matrixelemente von H_0 sowie die Überlappintegrale zwischen lokalen Wellenfunktionen verschiedener Zentren berechnen. Dies geschieht in folgenden Kapiteln.

Berechnung des Skalarprodukts

$$\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | n_x, n_y, n_z, j \rangle = \langle \hat{n}_x, i | n_x, j \rangle \langle \hat{n}_y, i | n_y, j \rangle \langle \hat{n}_z, i | n_z, j \rangle \quad (22)$$

Die Überlappintegrale zwischen den lokalen Wellenfunktionen verschiedener Oszillatoren lassen sich analytisch angeben.

Als Beispiel berechnen wir $\langle \hat{n}_x, i | n_x, j \rangle$:

$$\langle \hat{n}_x, i | n_x, j \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\rho_i(x-a_i)^2} H_{n_x}[\sqrt{\rho_i}(x-a_i)] e^{-\frac{1}{2}\rho_j(x-a_j)^2} H_{n_x}[\sqrt{\rho_j}(x-a_j)] dx \quad (23)$$

Durch die Transformation

$$x = \frac{p}{\sqrt{2}} u + \frac{a_i \rho_i + a_j \rho_j}{p} \quad (24)$$

können wir das Integral auf folgende Form bringen:

$$\langle \hat{n}_x, i | n_x, j \rangle = \frac{\sqrt{2}}{p} e^{-\frac{1}{2}d_x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} H_{n_x}[c_i(u-g_j)] H_{n_x}[c_j(u-g_i)] du \quad (25)$$

Dabei sind:

$$c_i = \frac{\sqrt{2}\rho_i}{p}, \quad g_i = \frac{\rho_i \delta_x}{\sqrt{2}p}, \quad d_x = \frac{\delta_x \sqrt{\rho_i \rho_j}}{p} \quad (26)$$

mit $p = \sqrt{\rho_i + \rho_j}$ und $\delta_x = a_i - a_j$

Mit Hilfe der Formel:

$$H_n(CX) = n! \sum_{m=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^m (2C)^{n-2m}}{(n-2m)! m!} X^{n-2m} \quad (27)$$

und unter Verwendung des Binomial-Lehrsatzes (29):

$$(U \pm g)^n = \sum_{k=0}^n \frac{n! (\pm g)^k}{(n-k)! k!} U^{n-k} \quad (28)$$

können wir die Hermite-Polynome in (25) wie folgt schreiben:

$$H_n [c(u \pm g)] = n! \sum_{m=0}^{[n/2]} \sum_{k=0}^{n-2m} \frac{(-1)^m (2c)^{n-2m-k} (\pm 1)^k}{(n-2m-k)! m! k!} U^{n-2m-k} \quad (29)$$

wobei $[x]$ die größte ganze Zahl $\leq x$ bedeutet.

Nach Einsetzen in (23) erhalten wir:

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_x, i | n_x, j \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{p} e^{-\frac{1}{2} d_x^2} \frac{[\hat{n}_x/2]! [\hat{n}_x/2]!}{\hat{n}_x! \hat{n}_x!} \sum_{m_1=0}^{[\hat{n}_x/2]} \sum_{m_2=0}^{[\hat{n}_x/2]} \sum_{k_1=0}^{\hat{n}_x-2m_1} \sum_{k_2=0}^{\hat{n}_x-2m_2} \frac{(-1)^{m_1+m_2+k_1} (2c_i)^{\hat{n}_x-2m_1}}{(\hat{n}_x-2m_1-k_1)! m_1! k_1!} \\ &\quad \frac{g_i^{k_2} (2c_j)^{\hat{n}_x-2m_2} g_j^{k_1}}{(\hat{n}_x-2m_2-k_2)! m_2! k_2!} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \frac{u^{\hat{n}_x + \hat{n}_x - 2m_1 - 2m_2 - k_1 - k_2}}{u} du \quad (30) \end{aligned}$$

$$\text{mit } \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} u^N du = \begin{cases} 0 & \text{für ungerade } N \\ \sqrt{\pi} \left(\frac{N+1}{2}\right)! & \text{für gerade } N \end{cases} \quad (31)$$

$\Gamma(x)$ stellt die Gamma-Funktion dar.

Berechnung der Matrixelemente von H_0

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | H_0 | n_x, n_y, n_z, j \rangle = \\ \frac{1}{2} [- \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | T | n_x, n_y, n_z, j \rangle \\ + \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | V | n_x, n_y, n_z, j \rangle] \end{aligned} \quad (32)$$

$$\text{mit } V(\vec{r}) = \frac{1}{2} [(x-a_l)^2 + (y-b_l)^2 + z^2] \quad (33)$$

$$\text{und } T = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (34)$$

Wir werden die beiden Terme getrennt berechnen.

Matrixelemente der kinetischen Energie

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | T | n_x, n_y, n_z, j \rangle = \\ \langle \hat{n}_z, i | n_z, j \rangle \{ \langle \hat{n}_x, i | \frac{\partial^2}{\partial x^2} | n_x, j \rangle \langle \hat{n}_y, i | n_y, j \rangle + \langle \hat{n}_y, i | \frac{\partial^2}{\partial y^2} | n_y, j \rangle \cdot \\ \langle \hat{n}_x, i | n_x, j \rangle \} + \langle \hat{n}_x, i | n_x, j \rangle \langle \hat{n}_y, i | n_y, j \rangle \langle \hat{n}_z, i | \frac{\partial^2}{\partial z^2} | n_z, j \rangle \end{aligned} \quad (35)$$

Mittels der Rekursionsbeziehungen der hermitischen Polynome, erhalten wir:

$$\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} |\eta, j\rangle = \rho_j \{ \eta(\eta-1) |\eta-2, j\rangle + .25 |\eta+2, j\rangle - (\eta+.5) |\eta, j\rangle \} \quad (36)$$

Die Matrixelemente schreiben sich dann wie folgt:

$$\begin{aligned} \langle \eta'_x, \eta'_y, \eta'_z, i | T | \eta_x, \eta_y, \eta_z, j \rangle &= \rho_j [\langle \eta'_x, i | \eta_x, j \rangle \langle \eta'_y, i | \eta_y, j \rangle \cdot \\ &\{ \eta_z(\eta_z-1) \langle \eta'_z, i | \eta_z-2, j \rangle + .25 \langle \eta'_z, i | \eta_z+2, j \rangle - (\eta_z+.5) \langle \eta'_z, i | \eta_z, j \rangle \\ &+ \langle \eta'_z, i | \eta_z, j \rangle \{ \langle \eta'_y, i | \eta_y, j \rangle (\eta_x(\eta_x-1) \langle \eta'_x, i | \eta_x-2, j \rangle + .25 \langle \eta'_x, i | \eta_x+2, j \rangle \\ &- (\eta_x+.5) \langle \eta'_x, i | \eta_x, j \rangle) + \langle \eta'_x, i | \eta_x, j \rangle (\eta_y(\eta_y-1) \langle \eta'_y, i | \eta_y-2, j \rangle \\ &+ .25 \langle \eta'_y, i | \eta_y+2, j \rangle - (\eta_y+.5) \langle \eta'_y, i | \eta_y, j \rangle) \}] \end{aligned} \quad (37)$$

Sie lassen sich vollständig durch die im vorhergehenden Abschnitt berechneten Überlappintegrale ausdrücken.

Matrixelemente des Potentials

$$\begin{aligned} \langle \eta'_x, \eta'_y, \eta'_z, i | V | \eta_x, \eta_y, \eta_z, j \rangle &= \\ &= \langle \eta'_x, \eta'_y, \eta'_z, i | \rho_\ell^2 [(x-a_\ell)^2 + (y-b_\ell)^2 + z^2] | \eta_x, \eta_y, \eta_z, j \rangle \end{aligned} \quad (38)$$

Da ρ_ℓ in den drei Bereichen verschieden sein kann, schreiben wir die Matrixelemente wie folgt:

$$\begin{aligned} \langle \eta'_x, \eta'_y, \eta'_z, i | V | \eta_x, \eta_y, \eta_z, j \rangle &= \\ &\langle \eta'_z, i | \eta_z, j \rangle \langle \eta'_x, \eta'_y, i | \rho_\ell^2 (x_\ell^2 + y_\ell^2) | \eta_x, \eta_y, j \rangle \\ &+ \langle \eta'_x, \eta'_y, i | \rho_\ell^2 | \eta_x, \eta_y, j \rangle \langle \eta'_z, i | z^2 | \eta_z, j \rangle \end{aligned} \quad (39)$$

wobei $x_1 = x - a_1$ und $y_1 = y - b_1$ sind.

Im Fall des symmetrischen Dreizentrenoszillators, wo alle ρ_l , $l = 1, 2, 3$ gleich sind, müssen wir nicht zwischen den verschiedenen Integrationsbereichen unterscheiden. Dann können wir ρ_l vor der Matrixelemente auf der rechten Seite der Gleichung (39) ziehen.

Nun gilt [siehe Anhang (B)].

$$Z^2 |n_z, j\rangle = \frac{1}{\rho_z} \{ n_z(n_z-1) |n_z-2, j\rangle + (n_z+5) |n_z, j\rangle + .25 |n_z+2, j\rangle \} \quad (40)$$

$$\begin{aligned} x_\ell^2 |n_x, j\rangle &= \frac{1}{\rho_x} [n_x(n_x-1) |n_x-2, j\rangle + (n_x+5) |n_x, j\rangle + .25 |n_x+2, j\rangle \\ &\quad + \sqrt{\rho_x} \delta_a \{ 2n_x |n_x-1, j\rangle + |n_x+1, j\rangle \}] + \delta_a^2 |n_x, j\rangle \end{aligned} \quad (41)$$

$$\begin{aligned} y_\ell^2 |n_y, j\rangle &= \frac{1}{\rho_y} [n_y(n_y-1) |n_y-2, j\rangle + (n_y+5) |n_y, j\rangle + .25 |n_y+2, j\rangle \\ &\quad + \sqrt{\rho_y} \delta_b \{ 2n_y |n_y-1, j\rangle + |n_y+1, j\rangle \}] + \delta_b^2 |n_y, j\rangle \end{aligned} \quad (42)$$

mit $\delta_a = a_j - a_1$ und $\delta_b = b_j - b_1$, $l = 1, 2, 3$

Setzen wir diese Beziehungen oben ein, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} \langle n'_x, n'_y, n'_z, i | V | n_x, n_y, n_z, j \rangle &= \frac{1}{\rho_z} \langle n'_z, i | n_z, j \rangle [n_x(n_x-1) \cdot \\ &\quad \langle n'_x, n'_y, i | \rho_\ell^2 | n_x-2, n_y, j \rangle + n_y(n_y-1) \langle n'_x, n'_y, i | \rho_\ell^2 | n_x, n_y-2, j \rangle + \\ &\quad .25 \{ \langle n'_x, n'_y, i | \rho_\ell^2 | n_x+2, n_y, j \rangle + \langle n'_x, n'_y, i | \rho_\ell^2 | n_x, n_y+2, j \rangle \} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \sqrt{\rho_j} \{ 2n_x \langle \dot{n}_x, \dot{n}_y, i | \rho_\ell^2 \delta_a | n_x-1, n_y, j \rangle + 2n_y \langle \dot{n}_x, \dot{n}_y, i | \rho_\ell^2 \delta_b | n_x, n_y-1, j \rangle \\
 & + \langle \dot{n}_x, \dot{n}_y, i | \rho_\ell^2 \delta_a | n_x+1, n_y, j \rangle + \langle \dot{n}_x, \dot{n}_y, i | \rho_\ell^2 \delta_a | n_x, n_y+1, j \rangle \} \\
 & + (n_x + n_y + 1) \langle \dot{n}_x, \dot{n}_y, i | \rho_\ell^2 | n_x, n_y, j \rangle + \rho_j \langle \dot{n}_x, \dot{n}_y, i | \rho_\ell^2 (\delta_x^2 + \delta_y^2) | n_x, n_y, j \rangle] \\
 & + \langle \dot{n}_x, \dot{n}_y, i | \rho_\ell^2 | n_x, n_y, j \rangle \langle \dot{n}_z, i | z^2 | n_z, j \rangle
 \end{aligned} \tag{43}$$

Dabei ist

$$\begin{aligned}
 \langle \dot{N}_x, \dot{N}_y, i | C_\ell | N_x, N_y, j \rangle = & C_1 \int_{-\infty}^0 dx F(x) \int_{-\infty}^{s_1 x} dy F(y) \\
 & + C_2 \left\{ \int_{-\infty}^0 dx F(x) \int_{s_1 x}^{\infty} dy F(y) + \int_0^{\infty} dx F(x) \int_{s_2 x}^{\infty} dy F(y) \right\} \\
 & + C_3 \int_0^{\infty} dx F(x) \int_{-\infty}^{s_2 x} dy F(y)
 \end{aligned} \tag{44}$$

mit

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2} [\rho_i (x-a_i)^2 + \rho_j (x-a_j)^2] \\
 F(x) = & e \cdot H_{N_x} [\sqrt{\rho_i} (x-a_i)] H_{N_x} [\sqrt{\rho_j} (x-a_j)]
 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2} [\rho_i (y-b_i)^2 + \rho_j (y-b_j)^2] \\
 F(y) = & e \cdot H_{N_y} [\sqrt{\rho_i} (y-b_i)] H_{N_y} [\sqrt{\rho_j} (y-b_j)]
 \end{aligned} \tag{45}$$

Die Integrale werden in Anhang (c) berechnet.

2. Erweiterung des Dreizentrenoszillatorschalenmodells

=====

In diesem Kapitel wird das Dreizentrenoszillatorschalenmodell erweitert, indem wir zum Hamiltonoperator H_0 den Spin-Bahn-Kopplungsterm sowie den L^2 -Term hinzufügen. Der Hamiltonoperator H hat dann die Form:

$$H = H_0 + V_{1s} + V_{1^2} \quad (46)$$

Die Potentiale V_{1s} und V_{1^2} lauten in dimensionslosen Koordinaten (wie in II.6)

$$V_{1s} = \frac{i K_\ell}{2 \rho_\ell} (\nabla \mathbf{V} \times \nabla) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (47)$$

$$V_{1^2} = \frac{1}{4} \frac{K_\ell \mu_\ell}{\rho_\ell^3} (\nabla \mathbf{V} \times \nabla)^2 + \frac{1}{2} K_\ell \mu_\ell \rho_\ell N(N+3) \delta_{ff'} \quad (48)$$

mit

$$V = \rho_\ell^2 [(x - a_\ell)^2 + (y - b_\ell)^2 + z^2] \quad (49)$$

$$\text{und } \rho_\ell = \frac{\omega_\ell}{\omega_1}, \quad \ell = 1, 2, 3 \quad (50)$$

K_1 und μ_1 hängen von der Massenzahl der Fragmente $\tilde{A}_1$ ab. Beim Übergang von Compoundkern in drei getrennte Fragmente wird ein stetiger Verlauf angenommen. Die Massenzahlabhängigkeit von K_1 und μ_1 ist von Gustafsson (31) angegeben worden (siehe Tabelle 1).

Tabelle 1

	$K_1(n)$	$K_1(P)$
$\tilde{A}_1 < 165$	$0.1000 - 0.0069 \cdot \tilde{A}_1^{1/3}$	$0.1020 - 0.0076 \cdot \tilde{A}_1^{1/3}$
$\tilde{A}_1 > 165$	$0.0509 - 0.0020 \cdot \tilde{A}_1^{1/3}$	$0.0768 - 0.0030 \cdot \tilde{A}_1^{1/3}$

Massenabhängigkeit von K_1 nach Gustafsson (31)

	$\mu_1(n)$	$\mu_1(P)$
$\tilde{A}_1 < 25$	0.0	0.0
$25 \leq \tilde{A}_1 < 125$	$-0.6257 + 0.2139 \tilde{A}_1^{1/3}$	$-0.9197 + 0.3145 \tilde{A}_1^{1/3}$
$\tilde{A}_1 \geq 125$	$0.919 - 0.095 \tilde{A}_1^{1/3}$	$0.638 + 0.003 \tilde{A}_1^{1/3}$

Massenabhängigkeit von μ_1 nach Gustafsson (31)

$$\text{mit } \tilde{A}_1 = \left(\frac{\omega_0}{\omega_l} \right)^3 (A_1 + A_2 + A_3), \quad l = 1, 2, 3 \quad (51)$$

Da V_{1s} und V_{12} vom Impuls $\vec{P}$ abhängen, erhalten wir komplexe Matrixelemente. Im symmetrischen Fall, wo alle drei Oszillatoren gleich sind, sind K_1, μ_1 und ω_1 in allen Bereichen gleich, und der Hamiltonoperator H ist hermitesch.

Im asymmetrischen Fall dagegen ist H nicht hermitesch, da K_1 , μ_1 und ω_1 in den drei Bereichen verschieden sind und deshalb nicht mit dem Impulsoperator $\vec{P}$ vertauschen. $\vec{P}$ selbst ist unstetig definiert.

Der Hamiltonoperator H wird auf einfache Weise hermitesch gemacht, indem wir ihn durch seine symmetrisierte Form ersetzen:

$$H = \frac{1}{2} (H + H^*) \quad (52)$$

Die Matrixelemente von H schreiben sich dann wie folgt:

$$\langle \vec{n}, i | H | n, j \rangle = \frac{1}{2} \{ \langle \vec{n}, i | H | n, j \rangle + \langle n, j | H | \vec{n}, i \rangle \} \quad (53)$$

Der Doppelstrich links vom Operator bedeutet, daß der Operator nur nach rechts wirkt.

Um die Spin-Bahn-Kopplung berücksichtigen zu können, müssen wir unsere Basisfunktionen $|n_x, n_y, n_z, j\rangle$ zu Spinbahnfunktionen erweitern, indem wir sie mit der Spinfunktion $|S\rangle$ multiplizieren mit $S = \pm \frac{1}{2}$

$$|\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (54)$$

Der Hamiltonoperator H wird in der neuen Basis

$$|n_x, n_y, n_z, S, j\rangle = |n_x, n_y, n_z, j\rangle |S\rangle \quad (55)$$

diagonalisiert. Die Eigenfunktionen Ψ haben folgende Darstellung:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\substack{n_x n_y n_z \\ x y z}} C_{x y z}^j |n_x, n_y, n_z, S, j\rangle \quad (56)$$

Um die Matrixelemente von V_{1s} und V_{12} zu berechnen, werden wir soweit möglich die Rekursionsbeziehungen der hermiteschen Polynome und die Ergebnisse aus (II.1) verwenden.

Wegen

$$V(x,y,z) = V(x,y,-z) \quad (57)$$

ist das Potential spiegelsymmetrisch zur x-y-Ebene.

Führen wir die Quantenzahl q ein,

$$q = (-1)^{n_z} \cdot S, \quad (58)$$

wobei S die Spinquantenzahl ist mit den Werten $\pm \frac{1}{2}$, können wir die Matrixelemente von H nach $q = +\frac{1}{2}$ oder $q = -\frac{1}{2}$ ordnen und deshalb die Darstellung von H in zwei Matrizen mit $q = +\frac{1}{2}$ oder $q = -\frac{1}{2}$ zerlegen. Da beide Matrizen dieselben Eigenwerte liefern, brauchen wir zu ihrer Berechnung nur eine der beiden Matrizen. Jeden Zustand besetzen wir dann mit zwei Teilchen entsprechend ihres Spins (35).

Auf diese Weise können wir die Dimension der Darstellung von H halbieren und somit Rechenzeit sparen.

Matrixelemente von V_{ls} :
=====

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{s}, i | V_{ls} | n_x, n_y, n_z, s, j \rangle = \\ \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{s}, i | \alpha_l (\nabla V \times \nabla) \cdot \sigma | n_x, n_y, n_z, s, j \rangle \end{aligned} \quad (59)$$

mit $\alpha_l = i \frac{\hbar l}{2\rho_l}$

Der Operator $\vec{F} = (\nabla V \times \nabla)$ hat in der Komponentenschreibweise in kartesischen Koordinaten die Form:

$$\begin{aligned} F_x &= \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \\ F_y &= \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \\ F_z &= \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \end{aligned} \quad (60)$$

Schreiben wir für das Produkt $\vec{F} \cdot \vec{\sigma}$

$$\vec{F} \cdot \vec{\sigma} = F_x \cdot \sigma_x + F_y \cdot \sigma_y + F_z \cdot \sigma_z \quad (61)$$

können wir das Matrixelement von V_{ls} wie folgt aufspalten:

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{s}, i | V_{ls} | n_x, n_y, n_z, s, j \rangle &= \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \alpha_l F_x | n_x, n_y, n_z, j \rangle \langle \hat{s} | \sigma_x | s \rangle \\ &+ \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \alpha_l F_y | n_x, n_y, n_z, j \rangle \langle \hat{s} | \sigma_y | s \rangle \\ &+ \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \alpha_l F_z | n_x, n_y, n_z, j \rangle \langle \hat{s} | \sigma_z | s \rangle \end{aligned} \quad (62)$$

σ_x, σ_y und σ_z sind die Paulimatrizen mit den Eigenschaften:

$$\begin{aligned}\sigma_x |\pm \frac{1}{2}\rangle &= |\mp \frac{1}{2}\rangle \quad , \quad \sigma_y |\pm \frac{1}{2}\rangle = \pm i |\mp \frac{1}{2}\rangle \\ \sigma_z |\pm \frac{1}{2}\rangle &= \pm |\pm \frac{1}{2}\rangle\end{aligned}\quad (63)$$

Für die Matrixelemente der Operatoren F_x, F_y und F_z erhalten wir, wenn wir ihre Darstellung in kartesischen Koordinaten einsetzen:

$$\begin{aligned}\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \alpha_\ell F_x | n_x, n_y, n_z, j \rangle = \\ 2 \{ \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \alpha_\ell y_\ell | n_x, n_y, j \rangle \langle \hat{n}_z, i | \frac{\partial}{\partial z} | n_z, j \rangle \\ - \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \alpha_\ell \frac{\partial}{\partial y} | n_x, n_y, j \rangle \langle \hat{n}_z, i | z | n_z, j \rangle \} \quad (64)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \alpha_\ell F_y | n_x, n_y, n_z, j \rangle = \\ 2 \{ \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \alpha_\ell \frac{\partial}{\partial x} | n_x, n_y, j \rangle \langle \hat{n}_z, i | z | n_z, j \rangle \\ - \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \alpha_\ell x_\ell | n_x, n_y, j \rangle \langle \hat{n}_z, i | \frac{\partial}{\partial z} | n_z, j \rangle \} \quad (65)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \alpha_\ell F_z | n_x, n_y, n_z, j \rangle = \\ 2 \langle \hat{n}_z, i | n_z, j \rangle \{ \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \alpha_\ell x_\ell \frac{\partial}{\partial y} | n_x, n_y, j \rangle \\ - \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \alpha_\ell y_\ell \frac{\partial}{\partial x} | n_x, n_y, j \rangle \} \quad (66)\end{aligned}$$

$$\text{mit } x_1 = x - a_1, \quad y_1 = y - b_1, \quad \alpha'_\ell = \rho_\ell^2 \alpha_\ell$$

Die auf der rechten Seite auftretenden Matrixelemente lassen sich unter Verwendung der Rekursionsbeziehungen der hermiteschen Polynome berechnen (siehe Anhang (B)), und wir erhalten:

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \alpha'_\ell F_x | n_x, n_y, n_z, j \rangle = \\ n_z \langle \hat{n}_z, i | n_z - 1, j \rangle \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \alpha'_\ell | n_x, n_y - 1, j \rangle \\ - n_y \langle \hat{n}_z, i | n_z + 1, j \rangle \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \alpha'_\ell | n_x, n_y + 1, j \rangle \\ + \sqrt{\rho_j} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \alpha'_\ell \delta_b | n_x, n_y, j \rangle \{ n_z \langle \hat{n}_z, i | n_z - 1, j \rangle \\ - \frac{1}{2} \langle \hat{n}_z, i | n_z + 1, j \rangle \} \end{aligned} \quad (67)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \alpha'_\ell F_y | n_x, n_y, n_z, j \rangle = \\ n_x \langle \hat{n}_z, i | n_z + 1, j \rangle \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \alpha'_\ell | n_x - 1, n_y, j \rangle \\ - n_z \langle \hat{n}_z, i | n_z - 1, j \rangle \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \alpha'_\ell | n_x + 1, n_y, j \rangle \\ - \sqrt{\rho_j} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \alpha'_\ell \delta_a | n_x, n_y, j \rangle \{ n_z \langle \hat{n}_z, i | n_z - 1, j \rangle \\ - \frac{1}{2} \langle \hat{n}_z, i | n_z + 1, j \rangle \} \end{aligned} \quad (68)$$

$$\begin{aligned}
 & \langle n'_x, n'_y, n'_z, i | \alpha'_\ell F_2 | n_x, n_y, n_z, j \rangle \\
 &= \langle n'_z, i | n_z, j \rangle [n_y \langle n'_x, n'_y, i | \alpha'_\ell | n_{x+1}, n_{y-1}, j \rangle \\
 & - n_x \langle n'_x, n'_y, i | \alpha'_\ell | n_{x-1}, n_{y-1}, j \rangle + \sqrt{p_j} \{ n_y \langle n'_x, n'_y, i | \alpha'_\ell \delta_a | n_x, n_{y-1}, j \rangle \\
 & - n_x \langle n'_x, n'_y, i | \alpha'_\ell \delta_b | n_{x-1}, n_y, j \rangle - \frac{1}{2} \langle n'_x, n'_y, i | \alpha'_\ell \delta_a | n_x, n_{y+1}, j \rangle \\
 & + \frac{1}{2} \langle n'_x, n'_y, i | \alpha'_\ell \delta_b | n_{x+1}, n_y, j \rangle \}] \quad (69)
 \end{aligned}$$

mit

$$\delta_a = a_j - a_\ell \quad \text{und} \quad \delta_b = b_j - b_\ell \quad , \quad \ell = 1, 2, 3$$

Matrizelemente von V_L^2 :

=====

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{s}, i | V_{\ell^2} | n_x, n_y, n_z, s, j \rangle = & \{ \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \beta_{\ell} (\nabla \mathbf{V} \times \nabla)^2 | n_x, n_y, n_z, j \rangle \\ & + \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \gamma_{\ell} N(N+3) \delta_{ff} | n_x, n_y, n_z, j \rangle \} \delta_{ss} \end{aligned} \quad (70)$$

$$\text{mit } \beta_{\ell} = \frac{1}{2} \frac{K_{\ell} \mu_{\ell}}{\rho_{\ell}^3} \quad \text{und} \quad \gamma_{\ell} = K_{\ell} \mu_{\ell} \rho_{\ell} \quad (71)$$

N ist die Hauptquantenzahl

$$N = n_x + n_y + n_z \quad (72)$$

und δ_{ff} bedeutet, daß nur diagonale Matrizelemente zu nehmen sind.

Der Operator F^2 schreibt sich wie folgt:

$$\vec{F}^2 = F_x^2 + F_y^2 + F_z^2 \quad (73)$$

$$F_x = \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y}$$

$$F_y = \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \quad (74)$$

$$F_z = \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x},$$

So erhalten wir:

$$\vec{F}^2 = 4\rho_{\ell}^2 [Q_1 + Q_2 - 2Q_3] \quad (75)$$

$$\text{mit } Q_1 = (x_\ell^2 + y_\ell^2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \quad (76)$$

$$Q_2 = x_\ell^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + y_\ell^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2 x_\ell y_\ell \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \quad (77)$$

$$Q_3 = x_\ell \left(z \frac{\partial}{\partial z} + 1 \right) \frac{\partial}{\partial x} + y_\ell \left(z \frac{\partial}{\partial z} + 1 \right) \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \quad (78)$$

Das Matrixelement von $V_{\ell 2}$ ergibt sich dann zu:

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{s}, i | V_{\ell 2} | n_x, n_y, n_z, s, j \rangle = \\ 4 [\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{s}, i | \gamma_\ell Q_1 | n_x, n_y, n_z, j \rangle + \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{s}, i | \gamma_\ell Q_2 | n_x, n_y, n_z, j \rangle \\ - 2 \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{s}, i | \gamma_\ell Q_3 | n_x, n_y, n_z, j \rangle] \delta_{ss'} \end{aligned} \quad (79)$$

$$\text{mit } \gamma_\ell = \rho_\ell k_\ell \mu_\ell$$

Im folgenden berechnen wir die einzelnen Terme.

$$2.1) \quad \underline{\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{s}, i | \gamma_\ell Q_1 | n_x, n_y, n_z, j \rangle}$$

$$\begin{aligned} = \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{s}, i | \gamma_\ell (x_\ell^2 + y_\ell^2) | n_x, n_y, j \rangle \langle \hat{n}_z, \hat{s}, i | \frac{\partial^2}{\partial z^2} | n_z, j \rangle \\ + \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{s}, i | \gamma_\ell \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) | n_x, n_y, j \rangle \langle \hat{n}_z, \hat{s}, i | z^2 | n_z, j \rangle \end{aligned} \quad (80)$$

Unter Verwendung der Ergebnisse in Anhang (B) erhalten wir:

$$\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \gamma_\ell Q_1 | n_x, n_y, n_z, j \rangle =$$

$$\{ 2 n_x (n_x - 1) \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \gamma_\ell | n_x - 2, n_y, j \rangle + 2 n_y (n_y - 1) \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \gamma_\ell | n_x, n_y - 2, j \rangle$$

$$+ \frac{1}{2} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \gamma_\ell | n_x + 2, n_y, j \rangle + \frac{1}{2} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \gamma_\ell | n_x, n_y + 2, j \rangle \} \{ DZ2$$

$$+ (n_z + \frac{1}{2}) \langle \hat{n}_z, i | n_z, j \rangle \} - 2 (n_z + \frac{1}{2}) (n_x + n_y + 1) \langle \hat{n}_z, i | n_z, j \rangle .$$

$$\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \gamma_\ell | n_x, n_y, j \rangle + \sqrt{\rho_j} \cdot DZ2 \{ 2 n_x \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \gamma_\ell \delta_a | n_x - 1, n_y, j \rangle$$

$$+ 2 n_y \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \gamma_\ell \delta_b | n_x, n_y - 1, j \rangle + \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \gamma_\ell \delta_a | n_x + 1, n_y, j \rangle$$

$$+ \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \gamma_\ell \delta_b | n_x, n_y + 1, j \rangle + \sqrt{\rho_j} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \gamma_\ell (\delta_a^2 + \delta_b^2) | n_x, n_y, j \rangle \}$$

(81)

mit: $DZ2 = n_z (n_z - 1) \langle \hat{n}_z, i | n_z - 2, j \rangle + .25 \langle \hat{n}_z, i | n_z + 2, j \rangle$

$$- (n_z + \frac{1}{2}) \langle \hat{n}_z, i | n_z, j \rangle$$

(82)

2.1) $\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \gamma_\ell Q_2 | n_x, n_y, n_z, j \rangle$

$$= \langle \hat{n}_z, i | n_z, j \rangle \{ \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \gamma_\ell x_\ell (x_\ell \frac{\partial}{\partial y} - y_\ell \frac{\partial}{\partial x}) \frac{\partial}{\partial y} | n_x, n_y, j \rangle$$

$$- \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \gamma_\ell y_\ell (x_\ell \frac{\partial}{\partial y} - y_\ell \frac{\partial}{\partial x}) \frac{\partial}{\partial x} | n_x, n_y, j \rangle$$

(83)

Verwenden wir die Ergebnisse von Anhang (B), erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 & \langle n'_x, n'_y, n'_z, i | \gamma_\rho Q_2 | n_x, n_y, n_z, j \rangle \\
 &= [n_y(n_y-1) \{ \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell | n_x, n_y-2, j \rangle + \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell | n_x+2, n_y-2, j \rangle \\
 &+ 2 \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_a | n_x+1, n_y-2, j \rangle + \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_a^2 | n_x, n_y-2, j \rangle \} \\
 &+ n_x(n_x-1) \{ \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell | n_x-2, n_y, j \rangle + \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell | n_x-2, n_y+2, j \rangle \\
 &+ 2 \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_b | n_x-2, n_y+1, j \rangle + \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_b^2 | n_x-2, n_y, j \rangle \} \\
 &- \frac{1}{4} \{ \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\rho | n_x+2, n_y, j \rangle + \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell | n_x, n_y+2, j \rangle \\
 &- \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_a^2 | n_x, n_y+2, j \rangle - \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_b^2 | n_x+2, n_y, j \rangle \\
 &- 2n_x n_y \{ \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_a | n_x-1, n_y, j \rangle + \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_a | n_x, n_y-1, j \rangle \\
 &+ \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_a \delta_b | n_x-1, n_y-1, j \rangle \} - (2n_x n_y + n_x + n_y + 1) \cdot \\
 &\langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell | n_x, n_y, j \rangle - (n_y+1) \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_a | n_x+1, n_y, j \rangle \\
 &- (n_x+1) \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_b | n_x, n_y+1, j \rangle + n_y \{ \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_b | n_x+2, n_y-1, j \rangle \\
 &+ \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_a \delta_b | n_x+1, n_y-1, j \rangle \} - \frac{1}{2} \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_a \delta_b | n_x+1, n_y+1, j \rangle \\
 &- (n_y + \frac{1}{2}) \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\rho \delta_a^2 | n_x, n_y, j \rangle - (n_x + \frac{1}{2}) \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\rho \delta_b^2 | n_x, n_y, j \rangle \\
 &- n_x \{ \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_a | n_x-1, n_y+2, j \rangle + \langle n'_x, n'_y, i | \gamma_\ell \delta_a \delta_b | n_x-1, n_y+1, j \rangle \} \\
 &\cdot \langle n'_z, i | n_z, j \rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 2.3.) \quad & \underline{\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \mathcal{Q}_3 | n_x, n_y, n_z, j \rangle} \\
 & = \langle \hat{n}_z, i | z \frac{\partial}{\partial z} + 1 | n_z, j \rangle \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \mathcal{Q}_\ell (x_\ell \frac{\partial}{\partial x} - y_\ell \frac{\partial}{\partial y}) | n_x, n_y, j \rangle \\
 & + \langle \hat{n}_z, i | z \frac{\partial}{\partial z} | n_z, j \rangle \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \mathcal{Q}_\ell | n_x, n_y, j \rangle \quad (85)
 \end{aligned}$$

Unter Verwendung der Ergebnisse in Anhang (B) erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 & \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, i | \mathcal{Q}_3 | n_x, n_y, n_z, j \rangle = \\
 & = z^2 [n_x(n_x-1) \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \mathcal{Q}_\ell | n_x-2, n_y, j \rangle - n_y(n_y-1) \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \mathcal{Q}_\ell | n_x, n_y-2, j \rangle \\
 & - \frac{1}{4} \{ \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \mathcal{Q}_\ell | n_x+2, n_y, j \rangle - \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \mathcal{Q}_\ell | n_x, n_y+2, j \rangle \} \\
 & + \sqrt{2} \{ n_x \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \mathcal{Q}_\ell \delta_a | n_x-1, n_y, j \rangle - n_y \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \mathcal{Q}_\ell \delta_b | n_x, n_y-1, j \rangle \\
 & - \frac{1}{2} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \mathcal{Q}_\ell \delta_a | n_x+1, n_y, j \rangle + \frac{1}{2} \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \mathcal{Q}_\ell \delta_b | n_x, n_y+1, j \rangle \}] \\
 & + \langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, i | \mathcal{Q}_\ell | n_x, n_y, j \rangle \{ z^2 - \langle \hat{n}_z, i | n_z, j \rangle \} \\
 \text{mit: } z^2 & = n_z(n_z-1) \langle \hat{n}_z, i | n_z-2, j \rangle + \frac{1}{2} \langle \hat{n}_z, i | n_z, j \rangle \\
 & - .25 \langle \hat{n}_z, i | n_z+2, j \rangle \quad (86)
 \end{aligned}$$

III. Volumenerhaltung

=====

Die Frequenzen ω_l der Oszillatorpotentiale, $l = 1, 2, 3$ werden durch die Geometrie unseres Modells und durch die Forderung der Oberflächenvolumenerhaltung bestimmt. Oberflächenvolumenerhaltung bedeutet, daß die Kernoberfläche eine Äquipotentialfläche ist, die stets auf dem gleichen Potential liegt und das gleiche Volumen einschließt.

An sich müßte das Volumen jeder Äquipotentialfläche konstant gehalten werden.

Wir beschränken uns jedoch zunächst auf Volumenerhaltung für die Kernoberfläche. Auf die Berechnung von Schalenkorrekturen hat die Art der Volumenerhaltung nur geringen Einfluß (8,10,11).

Das Potential V_0 und das Volumen W_0 des Ausgangskerns sind durch den kugelformigen Oszillator gegeben.

$$V_0 = \frac{1}{2} m \omega_0^2 R_0^2 \quad , \quad W_0 = \frac{4}{3} \pi R_0^3 \quad (1)$$

mit $R_0 = r_0 \cdot (A_1 + A_2 + A_3)^{\frac{1}{3}} \quad (r_0 = 1.25 \text{ fm}) ,$

$$\hbar \omega_0 = 41 \text{ Mev} \cdot (A_1 + A_2 + A_3)^{-\frac{1}{3}} \quad (2)$$

R_0 ist der Kernradius und W_0 die Oszillatorfrequenz des sphärischen Compoundkerns, r_0 ist die Radiuskonstante.

Das Potential des Dreizentrenoszillatorschalenmodells ohne L.S- und L^2 -Term ist in dimensionslosen Koordinaten gegeben durch (siehe II.1(6))

$$V = \rho_\ell^2 [(x-a_\ell)^2 + (y-b_\ell)^2 + z^2], \ell = 1, 2, 3 \quad (3)$$

mit

$$\rho_\ell = \frac{\omega_\ell}{\omega_1}, \quad (4)$$

wobei ℓ die Nummer des Bereiches ist.

(a_1, b_1) sind die x-y Koordinaten des 1-ten Oszillators. Abb. 31 zeigt eine der möglichen Kerngestalten des Modells. Wie in (9) wählen wir ρ_ℓ als Funktion des Abstandes a so, daß für kleine Werte von a unsinnige Kernformen vermieden werden. Sinnvollerweise wählt man ρ_ℓ zwischen $\rho_{\ell=1}$ und $\rho_\ell = \rho_{0\ell}$

$$\text{mit} \quad \rho_{0\ell} = \left(\frac{A_1}{A_\ell} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (5)$$

wobei A_1 die Massenzahl des 1-ten getrennten Fragmentes ist. ω_1 bzw. $\omega_\ell = \rho_\ell \omega_1$ sind durch folgenden Zusammenhang gegeben:

$$\omega_0 R_0 = \omega_1 \cdot r_1 \quad (6)$$

r_1 ist der Radius des sphärischen Fragmenten mit der Massenzahl $\tilde{A}_1$. Hieraus läßt sich ω_1 leicht bestimmen.

$$\omega_1 = \frac{41 \text{ Mev}}{\hbar} \frac{r_0}{r_1} \quad (7)$$

Um r_1 zu berechnen, müssen wir zwei Fälle unterscheiden.

1) getrennte bis berührende Fragmente.

$$(r_1 + r_2) \leq a < \infty \quad (8)$$

mit

$$r_\ell = \alpha_\ell r_1, \quad \alpha_\ell = \frac{1}{\rho_\ell} \quad (9)$$

Da wir das Volumen des Kerns während der Spaltung als konstant annehmen, haben wir folgende Gleichung:

$$R_o^3 = (1 + \alpha_{o2}^3 + \alpha_{o3}^3) \cdot r_1^3 \quad (10)$$

wobei $\alpha_{o\ell} = \frac{1}{\rho_{o\ell}}$ ist.

Aus Gleichung (10) ergibt sich

$$r_1 = \frac{R_o}{\sqrt[3]{1 + \alpha_{o2}^3 + \alpha_{o3}^3}} \quad (11)$$

im Bereich

$$\frac{R_o (1 + \alpha_{o2})}{\sqrt[3]{1 + \alpha_{o2}^3 + \alpha_{o3}^3}} \leq a < \infty \quad (12)$$

2) Zusammenhängende Fragmente.

$$0 \leq a \leq \frac{R_0(1 + \alpha_{02})}{\sqrt[3]{1 + \alpha_{02}^3 + \alpha_{03}^3}} \quad (13)$$

Wir haben in diesem Fall die folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} 4R_0^3 = & 2(1 + \alpha_3^3)r_1^3 + 3\{C_1 + \alpha_2^2(C_2 + C_2') + \alpha_3^2C_3\}r_1^2 \\ & - (C_1^3 + C_2^3 + C_2'^3 + C_3^3) - \frac{3}{\pi}(V_1 - V_2 - V_2' + V_3) \end{aligned} \quad (14)$$

Die Konstanten C_1, C_2, C_2' und C_3 sind aus Geometrie des Modells zu bestimmen (siehe Abb. (31)).

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{a^2 - (\alpha_2^2 - 1)r_1^2}{2a}, & C_2 &= a - C_1 \\ C_3 &= \frac{a'^2 - (\alpha_2^2 - \alpha_3^2)r_1^2}{2a'}, & C_2' &= a' - C_3 \end{aligned}$$

mit: $a' = g \cdot a, \quad g = \frac{\cos \phi_1}{\cos \phi_2} = \frac{\alpha_{02} + \alpha_{03}}{1 + \alpha_{02}},$

$$\phi_1 = \tan^{-1} \left[\frac{1 - g \cos \phi}{g \sin \phi} \right], \quad \phi_2 = \phi - \phi_1 \quad (15)$$

Die Volumina V_1, V_2, V_2' und V_3 sind durch dreifache Integrale gegeben:

$$\begin{aligned}
 v_1 = & 2 \int_{g_{x1}}^0 dx \int_{-s_1 x - d_1}^{g_{y1}} dy \int_0^{\sqrt{r_1^2 - x^2 - y^2}} dz + 2 \int_{g_{y1}}^{r_1} dy \int_{-\sqrt{r_1^2 - y^2}}^0 dx \int_0^{\sqrt{r_1^2 - x^2 - y^2}} dz \\
 & + 2 \int_0^{x_{01}} dx \int_{-s_1 x - d_1}^{\sqrt{r_1^2 - x^2}} dy \int_0^{\sqrt{r_1^2 - x^2 - y^2}} dz
 \end{aligned} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}
 v_2 = & 2 \int_{g_{x2}}^0 dx \int_{-s_1 x + d_2}^{g_{y2}} dy \int_0^{\sqrt{r_2^2 - x^2 - y^2}} dz + 2 \int_{g_{y2}}^{r_2} dy \int_{-\sqrt{r_2^2 - y^2}}^0 dx \int_0^{\sqrt{r_2^2 - x^2 - y^2}} dz \\
 & + 2 \int_0^{x_0} dx \int_{-s_1 x + d_2}^{\sqrt{r_2^2 - x^2}} dy \int_0^{\sqrt{r_2^2 - x^2 - y^2}} dz
 \end{aligned} \tag{17}$$

$$\begin{aligned}
 \hat{v}_2 = & 2 \int_0^{\hat{g}_{x2}} dx \int_{s_2 x + d_2'}^{\hat{g}_{y2}} dy \int_0^{\sqrt{r_2^2 - x^2 - y^2}} dz + 2 \int_{\hat{g}_{y2}}^{r_2} dy \int_0^{\sqrt{r_2^2 - y^2}} dx \int_0^{\sqrt{r_2^2 - x^2 - y^2}} dz \\
 & + 2 \int_{x_0}^0 dx \int_{s_2 x + d_2'}^{\sqrt{r_2^2 - x^2}} dy \int_0^{\sqrt{r_2^2 - x^2 - y^2}} dz
 \end{aligned} \tag{18}$$

$$\begin{aligned}
 v_3 = & 2 \int_{x_{03}}^{g_{x3}} dx \int_{s_2 x - d_3}^{g_{y3}} dy \int_0^{\sqrt{r_3^2 - x^2 - y^2}} dz + 2 \int_{g_{y3}}^{\sqrt{r_3^2 - x_{03}^2}} dy \int_{x_{03}}^{\sqrt{r_3^2 - y^2}} dx \int_0^{\sqrt{r_3^2 - x^2 - y^2}} dz
 \end{aligned} \tag{19}$$

mit

$$g_{x_1} = -C_1 \sin \phi_1 - \sqrt{r_1^2 - C_1^2} \cos \phi_1, \quad g_{y_1} = -S_1 g_{x_1} - d_1, \quad d_1 = \frac{C_1}{\cos \phi_1} \quad (20)$$

$$g_{x_2} = C_2 \sin \phi_1 - \sqrt{r_2^2 - C_2^2} \cos \phi_1, \quad g_{y_2} = -S_1 g_{x_2} + d_2, \quad d_2 = \frac{C_2}{\cos \phi_1} \quad (21)$$

$$\dot{g}_{x_2} = -\dot{C}_2 \sin \phi_2 - \sqrt{r_2^2 - C_2^2} \cos \phi_2, \quad \dot{g}_{y_2} = S_2 \dot{g}_{x_2} + \dot{d}_2, \quad \dot{d}_2 = \frac{\dot{C}_2}{\cos \phi_2} \quad (22)$$

$$g_{x_3} = C_3 \sin \phi_2 + \sqrt{r_3^2 - C_3^2} \cos \phi_2, \quad g_{y_3} = S_2 g_{x_3} + d_3, \quad d_3 = \frac{C_3}{\cos \phi_2} \quad (23)$$

$$x_0 = \frac{d_2 - d_3}{S_1 + S_2}, \quad x_{01} = x_0 - a \sin \phi_1, \quad x_{03} = x_0 + a \sin \phi_2 \quad (24)$$

Führen wir die Integrationen in (x, z) bzw. (y, z) Richtung aus, so reduzieren sich die o.a. dreifache Integrale auf folgende eindimensionale Integrale:

$$V_1 = \int_{g_{x1}}^{x_{01}} \left[(S_1 x + d_1) \sqrt{-(1+S_1^2)x^2 - 2S_1 d_1 x + r_1^2 - d_1^2} + (r_1^2 - x^2) \arcsin \frac{S_1 x + d_1}{\sqrt{r_1^2 - x^2}} \right] dx +$$

$$\begin{aligned}
 & + \int_{g_{x_1}}^0 \left[g_{y_1} \sqrt{r_1^2 - g_{y_1}^2 - x^2} + (r_1^2 - x^2) \arcsin \frac{g_{y_1}}{\sqrt{r_1^2 - x^2}} \right] dx \\
 & + \frac{\pi}{6} \left[2r_1^3 - 3r_1^2(g_{y_1} - x_{01}) + g_{y_1}^3 - x_{01}^3 \right]
 \end{aligned} \tag{25}$$

$$\begin{aligned}
 V_2 = & \int_{g_{x_2}}^{x_0} \left[(s_1 x - d_2) \sqrt{-(1+s_1^2)x^2 + 2s_1 d_2 x + r_2^2 - d_2^2} \right. \\
 & \left. + (r_2^2 - x^2) \arcsin \frac{s_1 x - d_2}{\sqrt{r_2^2 - x^2}} \right] dx \\
 & + \int_{g_{x_2}}^0 \left[g_{y_2} \sqrt{r_2^2 - g_{y_2}^2 - x^2} + (r_2^2 - x^2) \arcsin \frac{g_{y_2}}{\sqrt{r_2^2 - x^2}} \right] dx \\
 & + \frac{\pi}{6} \left[2r_2^3 - 3r_2^2(g_{y_2} - x_0) + g_{y_2}^3 - x_0^3 \right]
 \end{aligned} \tag{26}$$

$$\begin{aligned}
 V_2' = & \int_{g_{x_2}'}^{x_0} \left[(s_2 x + d_2') \sqrt{-(1+s_2^2)x^2 - 2s_2 d_2' x + r_2^2 - d_2'^2} \right. \\
 & \left. + (r_2^2 - x^2) \arcsin \frac{s_2 x + d_2'}{\sqrt{r_2^2 - x^2}} \right] dx \\
 & + \int_0^{g_{x_2}'} \left[g_{y_2}' \sqrt{r_2^2 - g_{y_2}'^2 - x^2} + (r_2^2 - x^2) \arcsin \frac{g_{y_2}'}{\sqrt{r_2^2 - x^2}} \right] dx \\
 & + \frac{\pi}{6} \left[2r_2^3 (g_{y_2}' + x_0) + g_{y_2}'^3 + x_0^3 \right]
 \end{aligned} \tag{27}$$

$$\begin{aligned}
 V_3 = & \int_{x_{03}}^{g_{y_3}} \left[g_{y_3} \sqrt{r_3^2 - g_{y_3}^2 - x^2} - (S_2 x - d_3) \sqrt{-(1+S_2^2)x^2 + 2S_2 d_3 x + r_3^2 - d_3^2} \right. \\
 & \left. + (r_3^2 - x^2) \left(\arcsin \frac{g_{y_3}}{\sqrt{r_3^2 - x^2}} - \arcsin \frac{S_2 x - d_3}{\sqrt{r_3^2 - x^2}} \right) \right] dx \\
 & - \int_{g_{y_3}}^{\sqrt{r_3^2 - x_{03}^2}} \left[x_{03} \sqrt{r_3^2 - x_{03}^2 - x^2} - (r_3^2 - x^2) \left(\frac{\pi}{2} - \arcsin \frac{x_{03}}{\sqrt{r_3^2 - x^2}} \right) \right] dx
 \end{aligned} \tag{28}$$

Die Integrale in x-Richtung werden in Anhang (D) berechnet.

Nach dem Einsetzen in (14) erhalten wir:

$$\eta_4 r_1^4 + \eta_3 r_1^3 + \eta_2 r_1^2 + \eta_0 - V = 0 \tag{29}$$

$$\text{mit: } \eta_4 = \frac{1}{2a'} \left[g(\alpha_2^2 - 1)^2 + (\alpha_2^2 - \alpha_3^2)^2 \right] \tag{30}$$

$$\eta_3 = -\frac{4}{3} (1 + \alpha_3^3) \tag{31}$$

$$\eta_2 = a \left[1 + \alpha_2^2 + g(\alpha_2^2 + \alpha_3^2) \right] \tag{32}$$

$$\eta_0 = -\frac{1}{6} a^3 (1 + g^3) - \frac{8}{3} R_0^3 \tag{33}$$

$$V = \frac{2}{\pi} (V_1 - V_2 - V_2' + V_3) \tag{34}$$

Hieraus kann $r(a)$ auf numerischem Weg ermittelt werden.

IV. Diskussion der Ergebnisse:

=====

In dieser Arbeit wurde ein Dreizentrenoszillatorschalenmodell vorgestellt, dessen Zentren sich in beliebiger geometrischer Anordnung in einer Ebene befinden können. Mit diesem Modell können die verschiedenen Spaltmoden sehr schwerer bzw. superschwerer Kerne wie oblate und prolate Dreifachspaltung sowie Clusterstrukturen leichter Kerne studiert werden.

Im folgenden stellen wir erste Ergebnisse vor, die mit dem symmetrischen bzw. asymmetrischen Dreizentrenoszillatorschalenmodell erzielt werden konnten.

1) Symmetrischer Dreizentrenoszillator:

Im symmetrischen Dreizentrenoszillatorschalenmodell, das Konfigurationen mit drei gleichen Fragmenten beschreibt, sind die Frequenzen ω_ℓ bzw. die Frequenzverhältnisse ρ_ℓ der drei Oszillatoren und κ_ℓ, μ_ℓ , ($\ell=1,2,3$) in den drei verschiedenen Bereichen gleich.

Abb. (11), (12), (13) zeigen die Eigenwerte $\lambda = (n_x + n_y + 1)$ des symmetrischen Dreizentrenoszillators in dimensionslosen Koordinaten ohne L^1 und L^2 Term in Abhängigkeit vom Deformationsparameter a für verschiedene Öffnungswinkel ϕ .

λ hängt mit den Eigenwerten $\varepsilon = E_0 / \hbar \omega_1$ wie folgt zusammen:

$$\varepsilon = (n_z + \frac{1}{2}) + \lambda \quad ,$$

n_z ist die Quantenzahl in Z-Richtung und positive ganzzahlig, $n_z = 0, 1, 2, \dots$. Für den Ausgangskern ($a=0$) und asymptotisch, für große Werte von a , ergeben sich die ganzzahligen Eigenwerte des sphärischen harmonischen Oszillators.

Asymptotisch sind die Eigenwerte dreifach entartet, da hier drei getrennte identische Fragmente vorliegen.

Mit wachsenden a laufen die unteren Eigenwerte viel eher zusammen als die oberen, da sich für die unteren Eigenwerte der Einfluß der Barrieren zwischen den Fragmenten viel eher bemerkbar macht.

In Abb. (10) bilden die Verbindungsachsen der drei Zentren ein gleichseitiges Dreieck, der Öffnungswinkel ist $\phi = 60^\circ$. Auf Grund dieser Symmetrie sind einige Eigenwerte als Funktion von a doppeltentartet (Abb. 11). Diese Entartung wird durch Änderung des Öffnungswinkel ϕ aufgehoben und die Aufspaltung ist für $\phi = 180^\circ$ maximal. In diesem Fall liegen die drei Zentren auf einer Geraden. Dies entspricht dem prolaten Aufbruch in drei gleiche Fragmente, und wir erhalten das Spektrum des linearen Dreizentrenoszillators (Abb. 12).

In Abb. (13) sind die Eigenwerte λ für einen sehr kleinen Öffnungswinkel ϕ als Funktion von a dargestellt, $\phi = 3^\circ$. Auf Grund des kleinen Winkels trennt sich ein Fragment sehr schnell von den beiden anderen, während diese noch zusammenhängen. Außerdem ist für kleine Werte von a der Abstand der beiden noch zusammenhängenden Fragmente sehr klein, so daß im Anfangsstadium der Separation das Spektrum wie das einer asymmetrischen binären Spaltung aussieht. Für größer werdendes a entfernt sich das eine Fragment weiter von den beiden anderen, die sich ihrerseits voneinander wegbewegen bis im Endstadium der Separation drei getrennte Fragmente vorliegen. Das Spektrum zeigt dies sehr deutlich:

Zunächst asymmetrische Spaltung des Compoundkerns, dann symmetrische Spaltung des schweren Partners, während die Eigenwerte des bereits getrennten Fragmentes konstant bleiben und schließlich dreifache entartete Eigenwerte, wenn drei getrennte Fragmente vorliegen.

Unser Modell enthält also auch sequentielle Spaltung; sie sollte jedoch nicht in unserem Modell behandelt werden, da diese Art des Aufbruchs in drei Fragmente nicht über den Rahmen der binären Spaltung hinausgeht.

Einen Eindruck von der Struktur des Einteilchenspektrums vermitteln die Abb. (14), (15), (16), (17). Sie zeigen die Einteilchenniveaus von C^{12} im symmetrischen Dreizentrenoszillator-schalenmodell in Abhängigkeit von Deformationsparameter a für verschiedene Öffnungswinkel ϕ , $\phi = 60^\circ$, $\phi = 150^\circ$, und zwar jeweils mit und ohne Berücksichtigung des Spin-Bahn-Kopplungs- und des L^2 -Terms.

Durch die Einbeziehung des V_{LS} und V_{L^2} Terms werden die Spektren wesentlich komplizierter. Für die Grenzfälle $a = 0$ (sphärischen Compoundkern) und sehr große Werte von a (drei getrennte sphärische Fragmente) werden die Spektren korrekt reproduziert. Sie sind in einem Fall durch die Hauptquantenzahl N des sphärischen Oszillators gekennzeichnet, im anderen Fall bei Berücksichtigung des V_{LS} und V_{L^2} Terms in der üblichen Weise.

Für $\phi = 60^\circ$ sind die doppelentarteten Zustände durch die Wirkung der Spin-Bahn-Kopplung aufgespalten.

Betrachten wir die Gesamtenergie leichter Kerne berechnet als Summe der Einteilchenenergien in Abhängigkeit des Deformationsparameters a für verschiedene konstante Öffnungswinkel ϕ , so sehen wir, daß für kleinen Abstand a die Gesamtenergie ein Minimum hat, während sie von einem gewissen a ab konstant bleibt. Dies ist in Abb. (18) für C^{12} ($\phi = 60^\circ$) gezeigt. Das Minimum bei $a \approx 1.5 \text{ fm}$ entspricht dem Grundzustand des C^{12} aufgebaut aus drei α -Cluster, deren Zentren einen Abstand von $a \approx 1.5 \text{ fm}$ haben und sich zu einem gleichseitigen Dreieck anordnen. Die entsprechende Kernfigur ist ebenfalls in Abb. (18) zu sehen. Die in a minimierte Gesamtenergie hat als Funktion des Öffnungswinkel ϕ zwei Minima bei $\phi = 60^\circ$ ($a \approx 1.5 \text{ fm}$) und $\phi = 150^\circ$ ($a \approx 0.9 \text{ fm}$).

Während sich im ersten Minimum die α -Cluster zu einem gleichseitigen Dreieck anordnen, liegen sie im zweiten Minimum fast auf einer Geraden (Abb. 19). H. Friedrich, L. Satpothy und A. Weiguny kommen in (36) zu ähnlichen Ergebnissen.

Eine realistischere Beschreibung erhalten wir, wenn die Gesamtenergie als Summe aus Liquid-Drop-Energie und Schalenkorrekturenergie berechnen. Abb. (20) zeigt die Gesamtenergie von C^{12} als Funktion von a für $\phi = 60^\circ$, das einem Aufbruch in drei α -Cluster entspricht. Die Liquid-Drop-Energie wurde nach Diehl (23) und die Schalenkorrekturenergie nach Stutinsky (37) berechnet.

Das Grundzustandsminimum von Abb. (18) ist hier etwas verschoben zu größeren Deformationen, $a \approx 2.2 \text{ fm}$. Die Spaltbarriere hat eine Höhe von ungefähr 22 MeV und liegt bei $a \approx 4 \text{ fm}$. Sie ist jedoch wesentlich niedriger als nach dem Tropfen-Modell, da die Schalenkorrekturen für $a \gg 2 \text{ fm}$ stark negativ werden. Vergleichen wir die Gesamtenergie im Dreizentrenoszillatorschalenmodell mit Rechnungen im α -Teilchen-Modell von Brink (38) und im Molekular-Orbital-Modell von Abe, Hinuro und Tanaka (39), so stellen wir fest, daß unsere Kurve dazwischen liegt. Abb. (21) zeigt die Bindungsenergie von C^{12} als Funktion von a für den Aufbruch in drei α -Cluster, deren Zentren ein gleichseitiges Dreieck bilden ($\phi = 60^\circ$).

Die im Molekular-Orbital-Modell berechnete Bindungsenergie Kurve ist in einem weiten Bereich von a konstant, während das α -Teilchen-Modell ein Minimum liefert, das zwar nicht in der Energie, aber in der Grundzustandskonfiguration mit unserem Minimum übereinstimmt.

Um unser Modell auf die Dreifachspaltung sehr schwerer Kerne anzuwenden, wurde zunächst der Aufbruch des superschweren Kerns $^{396}_{150}X_{246}$ in drei doppeltmagische Fragmente $^{132}_{50}Sn$ und $^{82}_{82}$ untersucht.

Man kann sich vorstellen, daß dieser Compoundkern in einer Reaktion zwischen zwei sehr schweren Kernen nach Abdampfung einiger leichter Teilchen gebildet wird. Diese Art des Aufbruchs in drei magische bzw. doppeltmagische Fragmente dürfte zu den interessantesten Fällen der Dreifachspaltung gehören, da die magische Struktur der Fragmente die Spaltbarriere erheblich erniedrigen sollte.

Abb. (22) zeigt die Liquid-Drop-Energie E_{LOM} nach Diehl (23), die Schalenkorrekturenergie δU nach Strutinsky (37) und die Gesamtenergie E als Summe der beiden in Abhängigkeit von Deformationsparameter a ($\Phi = 60^\circ$). Die Liquid-Drop-Energie E_{LOM} ist hier in bezug auf den Krümmungsradius minimiert, der die Übergangsfläche zwischen zwei Fragmenten beschreibt und ein Maß für deren Einschnürung ist. (23). Die Kurve für E_{LOM} weist eine Barriere von ungefähr 3 Mev auf, die sich in der Nähe des Grundzustandes ($a \approx 3.5 \text{ fm}$) befindet.

Da der interessante Bereich in der Gegend kleiner a -Werte liegt, sollten sich die Potentialenergiefläche bzw. die Einteilchenenergien und damit die Schalenkorrekturen δU als Funktion des Krümmungsradius für kleine Werte von a kaum ändern (40-42), so daß wir in guter Näherung die Schalenkorrekturenergie δU des Dreizentrenoszillatorschalenmodells mit spitzer Barriere verwenden können. δU ist eine Summe der Schalenkorrekturenergie für Protonen und Neutronen, $\delta U = \delta U_p + \delta U_n$. Die Schalenkorrekturenergie für getrennte Fragmente wird so stark negativ, daß die Liquid-Drop-Barriere verschwindet. Die Gesamtenergie E als Summe von E_{LOM} und δU hat deshalb keine Barriere. Der superschwere Kern $^{396}_{150}X_{246}$ ist somit instabil gegen den Aufbruch in drei doppeltmagische $^{132}_{50}Sn_{82}$.

Als Vergleich dazu wird in Abb. (23) die Kernenergie dieses superschweren Kerns als Funktion von λ für die binäre Spaltung in zwei gleiche Fragmente dargestellt. $\lambda = \frac{L}{2R_0}$ wobei L die Kernlänge und R_0 der Radius des sphärischen Compound-

kerns bedeuten. Hier ergibt sich weder für E_{LOM} noch für die Gesamtenergie $E = E_{LOM} + \delta U$ eine Barriere, sondern die Schalenkorrekturen sind für kleine Abstände so positiv, daß E der Gesamtenergie der Dreifachspaltung in Abb. (22) nahekommt. Natürlich kann die absolute Abhängigkeit der Energie von der Separationskoordinate a in den beiden Fällen nicht ohne weiteres verglichen werden, ohne die Dynamik dieser Koordinate zu kennen.

Die Schalenkorrekturen wurden mit einem Ausschmierungsparameter $\Gamma = 1.2 \hbar \omega$ berechnet. Für leichte Kerne ist δU auf $\pm 0.1 \text{ MeV}$ für schwere Kerne auf $\pm 0.5 \text{ MeV}$ genau. Die Rechenzeit zur Berechnung der Schalenkorrekturen hängt natürlich stark von der Zahl der verwandten Basiszustände ab. Diese beträgt etwa 20 sec. (105 Basiszustände) für leichte Kerne, jedoch 10 - 20 min. (660 Basiszustände) für schwere Kerne auf einer IBM 370/168.

2) asymmetrische Dreizentrenoszillator

Während wir im symmetrischen Dreizentrenoszillatorschalenmodell auf Kernformen beschränkt sind, deren Fragmente gleich sind, haben wir es in asymmetrischen Dreizentrenoszillatorschalenmodell mit beliebigen kugelförmigen Fragmenten zu tun, $\rho_\ell = \omega_\ell / \omega_1$, K_ℓ , μ_ℓ , $\ell = 1, 2, 3$ in den drei Bereichen verschieden.

Damit können Clusterstrukturen leichter Kerne aufgebaut aus verschiedenen Clustern wie ^4He , ^8Be , ^{12}C , ^{16}O sowie der Aufbruch schwerer bzw. superschwerer Kerne in drei verschiedene Fragmente studiert werden.

Um physikalisch unsinnige Kernformen bei kleinen Zentrenabständen a zu vermeiden, wurde ρ_ℓ als Funktion von a wie folgt angenommen:

$$\rho_\ell = \begin{cases} 1 - a(1 - \rho_{0\ell})/G & , a < G \\ \rho_{0\ell} & , a \geq G \end{cases} \quad , \ell = 1, 2, 3$$

d.h. ρ_ℓ wurde zwischen dem sphärischen Compoundkern ($\rho_\ell = 1$) und dem Fall dreier sich berührender bzw. getrennter Fragmente ($\rho_\ell = \rho_{0\ell}$) linear interpoliert.

G gibt den Bereich an, in dem die drei Fragmente noch zusammenhängen.

Die ersten Rechnungen im asymmetrischen Dreizentrenoszillator-schalenmodell zeigen, daß dieses Modell für beliebige Werte der Asymmetrie Parameter ρ_ℓ , a vernünftige Einteilchenenergieniveaus liefert und insbesondere den Grenzfall dreier getrennter Fragmente richtig wiedergibt.

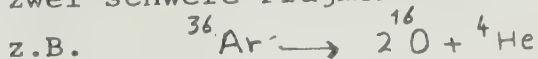
Um einen Eindruck von den Einteilchenenergieniveaus zu vermitteln, haben wir zunächst für leichte Kerne asymmetrischen Aufbruch in drei Fragmente untersucht.

Ein Kern wird folgende Möglichkeiten haben in drei verschiedene Fragmente aufzubrechen.

- zwei leichte Fragmente und ein schweres Fragment,



- zwei schwere Fragmente und ein leichtes Fragment,



- drei verschiedene Fragmente vergleichbarer Masse,

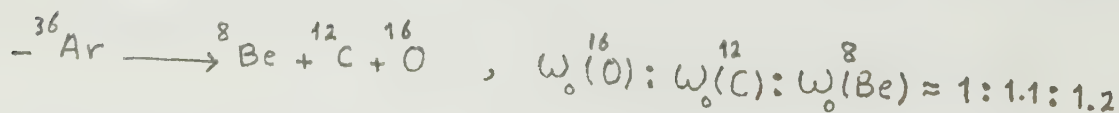
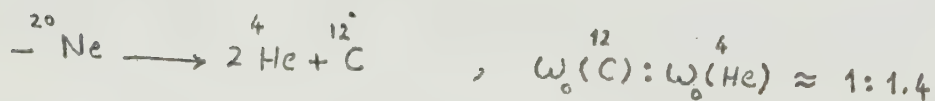


In den Abb. (24) - (29) sind die Einteilchenenergieniveaus als Funktion des Zentrenabstandes a bei konstantem Öffnungswinkel ϕ mit und ohne $L.s$ - bzw. L^2 - Term für diese verschiedenen Aufbrüche dargestellt.

Wie im symmetrischen Fall - dem Aufbruch in drei gleiche Fragmente - ergibt sich für $a = 0$ das Spektrum des sphärischen Oszillators des Compoundkerns, während für große Werte von a das Spektrum eine Überlagerung der Einteilchenenergieniveaus der einzelnen sphärischen Fragmente darstellt. Dabei sind je nach Aufbruch die verschiedenen Schalen für große Werte von a doppeltentartet, wenn zwei der drei Fragmente gleich sind und durch verschieden große Schalenabstände charakterisiert.

Da die Schalenenergie proportional zur Oszillatorfrequenz ist, sind die Schalenabstände der leichten Fragmente größer als die schweren Fragmente.

Für große Werte von a sind die Schalen des schweren Fragmentes mit der mittleren Masse durch M gekennzeichnet. Asymptotisch ergeben sich für die verschiedenen Aufbrüche folgende Frequenzverhältnisse für die entsprechenden sphärischen Oszillatoren:



Für verschiedene konstante Werte der Deformationsparameter $\rho_{0\ell}$, $\ell = 1, 2, 3$, die verschiedenen Darstellungen des Compoundkerns durch drei Cluster entsprechen, hat die in bezug auf Abstand a minimierte Summe der Einteilchenenergien als Funktion des Öffnungswinkels ϕ immer zwei Minima in der Gegend von $\phi \approx 60^\circ$ und $\phi \approx 150^\circ$. Dies ist in Abb. (30) für ^{36}Ar gezeigt.

Dabei liegt die Kurve, die dem symmetrischen Aufbruch in drei ^{12}C -Kerne entspricht, wie erwartet energetisch am tiefsten.

V. Zusammenfassung und Ausblick

=====

Mit dem in dieser Arbeit vorgestellten Dreizentrenoszillator-schalenmodell ist es möglich, sowohl Dreifachspaltung schwerer und superschwerer Kerne als auch Clusterstrukturen leichter Kerne zu untersuchen.

Auf Grund der Geometrie und Parametrisierung des Modells ist eine Fülle von Kernformen möglich, mit deren Hilfe stark asymmetrische bis voll symmetrische Clusterkonfigurationen beschrieben werden können, die einem Aufbruch in drei verschiedene bzw. drei gleiche Fragmente entsprechen. Natürlich wird in den meisten Fällen die Art der Konfigurationen durch Symmetrie und Schaleneffekte bestimmt werden.

In diesem Zusammenhang ist es interessant, nicht nur den Aufbruch eines superschweren Kerns in drei gleiche (doppelmagische) Fragmente $^{132}_{50}Sn$ zu untersuchen, sondern auch Konfigurationen wie $^{40}_{20}Ca + 2\ ^{208}_{82}Pb$

Überhaupt könnte man sich vorstellen, daß die Spaltung eines superschweren Kerns durch Schaleneffekte der Pb-Schale beeinflusst wird ein analogie zur binären Spaltung der Aktiniden, wo die asymmetrische Spaltung durch die $Z = 50$ - und $N = 82$ -Schale bestimmt wird.

Eine qualitative Studie asymmetrischer Aufbrüche schwerer Kerne ist zwar im Rahmen unseres Modells möglich, jedoch fehlt ein Flüssigkeitstropfen-Modell, das solch asymmetrische Konfigurationen beschreiben kann, um realistische Ergebnisse im Sinne der Strutinsky Methode erhalten zu können.

Deshalb ist die Entwicklung eines Flüssigkeitstropfen-Modells, das eine Vielfalt asymmetrischer Konfigurationen zuläßt, eine sicherlich nicht leichte aber wichtige Aufgabe für die Zukunft.

ANHANG A

Behandlung des Eigenwertproblems in nichtorthogonaler Basis

Zur Lösung des Eigenwertproblems betrachten wir die Matrix-Darstellung der Schrödinger-Gleichung:

$$(\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{S}, i | H | n_x, n_y, n_z, S, j \rangle) |\Psi\rangle = E (\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{S}, i | n_x, n_y, n_z, S, j \rangle) |\Psi\rangle \quad (1)$$

Da unsere Basisfunktionen nicht orthogonal sind, ist die Matrix auf der rechten Seite von (1), deren Elemente Skalarprodukte sind, nicht diagonal. Bezeichnen wir die in (1) auftretenden Matrizen mit A und S, so können wir (1) wie folgt schreiben:

$$A |\Psi\rangle = E \cdot S |\Psi\rangle \quad (2)$$

mit $A = (\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{S}, i | H | n_x, n_y, n_z, S, j \rangle)$

und $S = (\langle \hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z, \hat{S}, i | n_x, n_y, n_z, S, j \rangle)$

Da S symmetrisch ist und reelle Elemente besitzt, ist S hermitesch. Es existiert eine unitäre Transformation U, die S diagonalisiert. Transformieren wir (1) mit U, erhalten wir:

$$(U A U^\dagger) U |\Psi\rangle = E (U S U^\dagger) U |\Psi\rangle \quad (3)$$

Wir können diese Gleichung auch schreiben als:

$$\hat{A} |\hat{\psi}\rangle = E S |\hat{\psi}\rangle \quad (4)$$

mit $A = UAU^\dagger$, $S = USU^\dagger$, $|\hat{\psi}\rangle = U|\psi\rangle$,

wobei S eine diagonale Matrix ist.

Gleichung (4) stellt das gleiche Eigenwertproblem dar wie Gleichung (2). Da S nur positive Eigenwerte hat, existiert eine reguläre diagonale Matrix x mit der Eigenschaft

$$x \cdot x = S \quad (5)$$

Transformieren wir Gleichung (2) mit x , so erhalten wir:

$$(x \hat{A} x^{-1}) x |\hat{\psi}\rangle = E (x \hat{S} x^{-1}) x |\hat{\psi}\rangle \quad (6)$$

Nach Multiplikation der Gleichung (6) von links mit $\hat{S}^{-1}$ ergibt sich:

$$\hat{S}^{-1} (x \hat{A} x^{-1}) x |\hat{\psi}\rangle = E \hat{S}^{-1} (x \hat{S} x^{-1}) x |\hat{\psi}\rangle \quad (7)$$

Da x und $\hat{S}$ als diagonale Matrizen vertauschbar sind, und wegen $\hat{S}^{-1} x = x^{-1}$

erhalten wir:

$$(x^{-1} \hat{A} x^{-1}) x |\hat{\psi}\rangle = E x |\hat{\psi}\rangle \quad (8)$$

oder
$$\hat{A}'' |\psi''\rangle = E |\psi''\rangle$$

mit
$$\hat{A}'' = x^{-1} \hat{A} x^{-1}, \quad |\psi''\rangle = x |\psi\rangle \quad (9)$$

Die Eigenwertgleichung (9) ist unserem ursprünglichen Eigenwertproblem in (1) äquivalent.

Wenn die Matrix A hermitesch ist, sind auch die Matrizen $\hat{A}$ und $\hat{A}''$ hermitesch; denn die Hermitizität einer Matrix bleibt unter unitären Transformationen erhalten und x^{-1} ist wie jede Diagonalmatrix mit reellen Elementen hermitesch. Die Eigenwertgleichung (9) wird nun auf gleiche Weise diagonalisiert, wie beim Eigenwertproblem in einer orthonormalen Basis

$$V \hat{A}'' V^\dagger V |\psi''\rangle = E V |\psi''\rangle \quad (10)$$

$\hat{A}''' = V \hat{A}'' V^\dagger$ enthält in der Diagonale die Eigenwerte des Problems.

Anhang (B)
=====

Berechnung von $\hat{A}|\phi\rangle$

$$\text{B.1) } \frac{\partial}{\partial x} |\eta_x, j\rangle = \frac{\partial}{\partial x} e^{-\frac{1}{2}\rho_j x_j^2} H_{\eta_x}(\sqrt{\rho_j} x_j) \quad (1)$$

$$\text{mit } x_j = x - a_j$$

Unter Verwendung der Rekursionsbeziehungen der Hermite-Poly

$$\frac{\partial}{\partial \eta} H_n(\eta) = 2\eta H_{n-1}(\eta)$$

$$\eta H_n(\eta) = n H_{n-1}(\eta) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\eta) \quad (2)$$

erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial x} H_{\eta_x}(\sqrt{\rho_j} x_j) e^{-\frac{1}{2}\rho_j x_j^2} = \sqrt{\rho_j} \left\{ \eta_x H_{\eta_x-1}(\sqrt{\rho_j} x_j) - \frac{1}{2} H_{\eta_x+1}(\sqrt{\rho_j} x_j) \right\} e^{-\frac{1}{2}\rho_j x_j^2} \quad (3)$$

Dann ergibt sich (1) zu:

$$\frac{\partial}{\partial x} |\eta_x, j\rangle = \sqrt{\rho_j} \left\{ \eta_x |\eta_x-1, j\rangle - \frac{1}{2} |\eta_x+1, j\rangle \right\} \quad (4.a)$$

und in Analogie

$$\frac{\partial}{\partial y} |\eta_y, j\rangle = \sqrt{\rho_j} \left\{ \eta_y |\eta_y-1, j\rangle - \frac{1}{2} |\eta_y+1, j\rangle \right\} \quad (4.b)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} |\eta_z, j\rangle = \sqrt{\rho_j} \left\{ \eta_z |\eta_z-1, j\rangle - \frac{1}{2} |\eta_z+1, j\rangle \right\} \quad (4.c)$$

$$\text{B.2) } \underline{\frac{\partial}{\partial x^2} |n_x, j\rangle} = \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{\rho_j} \left\{ n_x |n_x - 1, j\rangle - \frac{1}{2} |n_x + 1, j\rangle \right\} \quad (5)$$

Ausgehend von Gleichung (3) schreiben wir (5) wie folgt:

$$\frac{\partial}{\partial x} e^{-\frac{1}{2}\rho_j x_j^2} H_{n_x-1}(\sqrt{\rho_j} x_j) = \sqrt{\rho_j} \left\{ (n_x - 1) H_{n_x-2}(\sqrt{\rho_j} x_j) - \frac{1}{2} H_{n_x}(\sqrt{\rho_j} x_j) \right\} e^{-\frac{1}{2}\rho_j x_j^2} \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} e^{-\frac{1}{2}\rho_j x_j^2} H_{n_x+1}(\sqrt{\rho_j} x_j) = \sqrt{\rho_j} \left\{ (n_x + 1) H_{n_x}(\sqrt{\rho_j} x_j) - \frac{1}{2} H_{n_x+2}(\sqrt{\rho_j} x_j) \right\} e^{-\frac{1}{2}\rho_j x_j^2}$$

Setzen wir diese Gleichungen in (5) ein, so erhalten wir:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} |n_x, j\rangle = \rho_j \left\{ n_x (n_x - 1) |n_x - 2, j\rangle + \frac{1}{4} |n_x + 2, j\rangle - (n_x + \frac{1}{2}) |n_x, j\rangle \right\} \quad (7.a)$$

und in Analogie

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} |n_y, j\rangle = \rho_j \left\{ n_y (n_y - 1) |n_y - 2, j\rangle + \frac{1}{4} |n_y + 2, j\rangle - (n_y + \frac{1}{2}) |n_y, j\rangle \right\} \quad (7.b)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} |n_z, j\rangle = \rho_j \left\{ n_z (n_z - 1) |n_z - 2, j\rangle + \frac{1}{4} |n_z + 2, j\rangle - (n_z + \frac{1}{2}) |n_z, j\rangle \right\} \quad (7.c)$$

$$\text{B.3) } \underline{x_\ell |n_x, n_y, j\rangle} = (x - a_\ell) e^{-\frac{1}{2}\rho_j(x_j^2 + y_j^2)} H_{n_x}(\sqrt{\rho_j} x_j) H_{n_y}(\sqrt{\rho_j} y_j) \quad (8)$$

$$(x - a_\ell) H_{n_x}[\sqrt{\rho_j}(x - a_j)] = \frac{1}{\sqrt{\rho_j}} \left[(x - a_j) H_{n_x}[\sqrt{\rho_j}(x - a_j)] + \right.$$

$$+ \sqrt{\rho_j} (a_j - a_\ell) H_{n_x}[\sqrt{\rho_j}(x - a_j)]$$

Unter Benutzung der Rekursionsformeln (2) erhalten wir:

$$x_\ell H_{n_x}(\sqrt{\rho_j} x_j) = \frac{1}{\sqrt{\rho_j}} [n_x H_{n_x-1}(\sqrt{\rho_j} x_j) + \frac{1}{2} H_{n_x+1}(\sqrt{\rho_j} x_j) + \sqrt{\rho_j} \delta_a H_{n_x}(\sqrt{\rho_j} x_j)] \quad (9)$$

mit: $\delta_a = a_j - a_\ell$

Nach dem Einsetzen in (8) folgt:

$$x_\ell |n_x, n_y, j\rangle = \frac{1}{\sqrt{\rho_j}} \{ n_x |n_x-1, n_y, j\rangle + \frac{1}{2} |n_x+1, n_y, j\rangle + \sqrt{\rho_j} \delta_a |n_x, n_y, j\rangle \} \quad (10.a)$$

Analog dazu gilt

$$y_\ell |n_x, n_y, j\rangle = \frac{1}{\sqrt{\rho_j}} \{ n_y |n_x, n_y-1, j\rangle + \frac{1}{2} |n_x, n_y+1, j\rangle + \sqrt{\rho_j} \delta_b |n_x, n_y, j\rangle \} \quad (10.b)$$

$$z |n_z, j\rangle = \frac{1}{\sqrt{\rho_j}} \{ n_z |n_z-1, j\rangle + \frac{1}{2} |n_z+1, j\rangle \} \quad (10.c)$$

mit: $\delta_b = b_j - b_\ell$

$$\text{B.4) } \underline{X_e^2 |n_x, n_y, j\rangle =}$$

$$= X_e \left[\frac{1}{\sqrt{\rho_j}} \{ n_x |n_x-1, n_y, j\rangle + \frac{1}{2} |n_x+1, n_y, j\rangle + \sqrt{\rho_j} \delta_a |n_x, n_y, j\rangle \} \right] \quad (11)$$

Ausgehend von Gleichung (9) erhalten wir:

$$\begin{aligned} X_e |n_x-1, n_y, j\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\rho_j}} \{ (n_x-1) |n_x-2, n_y, j\rangle + \frac{1}{2} |n_x, n_y, j\rangle \\ &\quad + \sqrt{\rho_j} \delta_a |n_x-1, n_y, j\rangle \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_e |n_x+1, n_y, j\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\rho_j}} \{ (n_x+1) |n_x, n_y, j\rangle + \frac{1}{2} |n_x+2, n_y, j\rangle \\ &\quad + \sqrt{\rho_j} \delta_a |n_x+1, n_y, j\rangle \} \end{aligned}$$

Nach dem Einsetzen in (11) folgt:

$$\begin{aligned} X_e^2 |n_x, n_y, j\rangle &= \frac{1}{\rho_j} [n_x(n_x-1) |n_x-2, n_y, j\rangle \\ &\quad + \frac{1}{4} |n_x+2, n_y, j\rangle + (n_x + \frac{1}{2}) |n_x, n_y, j\rangle \\ &\quad + \sqrt{\rho_j} \delta_a \{ 2 n_x |n_x-1, n_y, j\rangle + |n_x+1, n_y, j\rangle \} \\ &\quad + \delta_a^2 |n_x, n_y, j\rangle \end{aligned} \quad (12.a)$$

Entsprechend gilt:

$$y_e^2 |n_x, n_y, j\rangle = \frac{1}{\rho_j} [n_y(n_y-1) |n_x, n_y-2, j\rangle + \frac{1}{4} |n_x, n_y+2, j\rangle + (n_y + \frac{1}{2}) |n_x, n_y, j\rangle + \sqrt{\rho_j} \delta_b \{ 2n_y |n_x, n_y-1, j\rangle + |n_x, n_y+1, j\rangle \}] + \delta_b^2 |n_x, n_y, j\rangle \quad (12.)$$

$$z^2 |n_z, j\rangle = \frac{1}{\rho_j} [n_z(n_z-1) |n_z-2, j\rangle + \frac{1}{4} |n_z+2, j\rangle + (n_z + \frac{1}{2}) |n_z, j\rangle] \quad (12.)$$

B.5) :
$$x_e \frac{\partial}{\partial y} |n_x, n_y, j\rangle = x_e e^{-\frac{1}{2}\rho_j x_j^2} H_{n_y}(\sqrt{\rho_j} x_j) \frac{\partial}{\partial y} e^{-\frac{1}{2}\rho_j y_j^2} H_{n_x}(\sqrt{\rho_j} y_j) \quad (13)$$

Aus den Gleichungen (4) und (8) folgt:

$$x_e \frac{\partial}{\partial y} |n_x, n_y, j\rangle = n_x n_y |n_x-1, n_y-1, j\rangle - \frac{1}{2} n_x |n_x-1, n_y+1, j\rangle + \frac{1}{2} n_y |n_x+1, n_y-1, j\rangle - \frac{1}{4} |n_x+1, n_y+1, j\rangle + \sqrt{\rho_j} \delta_a \{ n_y |n_x, n_y-1, j\rangle - \frac{1}{2} |n_x, n_y+1, j\rangle \} \quad (14.a)$$

$$y_e \frac{\partial}{\partial x} |n_x, n_y, j\rangle = n_x n_y |n_x-1, n_y-1, j\rangle - \frac{1}{2} n_y |n_x+1, n_y-1, j\rangle + \frac{1}{2} n_x |n_x-1, n_y+1, j\rangle - \frac{1}{4} |n_x+1, n_y+1, j\rangle + \sqrt{\rho_j} \delta_b \{ n_x |n_x-1, n_y, j\rangle - \frac{1}{2} |n_x+1, n_y, j\rangle \} \quad (14.b)$$

B.6): $x_e \frac{\partial}{\partial x} |n_x, n_y, j\rangle$

$$x_e \frac{\partial}{\partial x} |n_x, n_y, j\rangle = n_x(n_x-1) |n_x-2, n_y, j\rangle - \frac{1}{2} |n_x, n_y, j\rangle - \frac{1}{4} |n_x+2, n_y, j\rangle \\ + \sqrt{\rho_j} \delta_a \{ n_x |n_x-1, n_y, j\rangle - \frac{1}{2} |n_x+1, n_y, j\rangle \} \quad (15.a)$$

$$y_e \frac{\partial}{\partial y} |n_x, n_y, j\rangle = n_y(n_y-1) |n_x, n_y-2, j\rangle - \frac{1}{2} |n_x, n_y, j\rangle - \frac{1}{4} |n_x, n_y+2, j\rangle \\ + \sqrt{\rho_j} \delta_b \{ n_y |n_x, n_y-1, j\rangle - \frac{1}{2} |n_x, n_y+1, j\rangle \} \quad (15.b)$$

$$z \frac{\partial}{\partial z} |n_z, j\rangle = n_z(n_z-1) |n_z-2, j\rangle - \frac{1}{2} |n_z, j\rangle - \frac{1}{4} |n_z+2, j\rangle \quad (15.c)$$

B.7): $y_e^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} |n_x, n_y, j\rangle = n_x(n_x-1) \{ n_y(n_y-1) |n_x-2, n_y-2, j\rangle$

$$+ \frac{1}{4} |n_x-2, n_y+2, j\rangle + (n_y + \frac{1}{2}) |n_x-2, n_y, j\rangle \} + \frac{1}{4} \{ n_y(n_y-1)$$

$$|n_x+2, n_y-2, j\rangle + \frac{1}{4} |n_x+2, n_y+2, j\rangle + (n_y + \frac{1}{2}) |n_x+2, n_y, j\rangle \}$$

$$- (n_x + \frac{1}{2}) \{ n_y(n_y-1) |n_x, n_y-2, j\rangle + \frac{1}{4} |n_x, n_y+2, j\rangle + (n_y + \frac{1}{2})$$

$$|n_x, n_y, j\rangle \} + \sqrt{\rho_j} \delta_b \{ n_x(n_x-1) (2n_y |n_x-2, n_y-1, j\rangle$$

$$+ |n_x-2, n_y+1, j\rangle) + \frac{1}{4} (2n_y |n_x+2, n_y-1, j\rangle + |n_x+2, n_y+1, j\rangle)$$

$$- (n_x + \frac{1}{2}) (2n_y |n_x, n_y-1, j\rangle + |n_x, n_y-1, j\rangle) \} +$$

$$+ \delta_b^2 \{ \eta_x(\eta_x-1) | \eta_x-2, \eta_y, j \rangle + \frac{1}{4} | \eta_x+2, \eta_y, j \rangle - (\eta_x+\frac{1}{2}) | \eta_x, \eta_y, j \rangle \} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \text{B.8): } \quad & \underline{y_\ell^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} | \eta_x, \eta_y, j \rangle} = \eta_x(\eta_x-1) \{ \eta_y(\eta_y-1) | \eta_x-2, \eta_y-2, j \rangle \\ & + (\eta_y+\frac{1}{2}) | \eta_x-2, \eta_y, j \rangle + \frac{1}{4} | \eta_x-2, \eta_y+2, j \rangle \} + \frac{1}{4} \{ \eta_y(\eta_y-1) \\ & | \eta_x+2, \eta_y-2, j \rangle + \frac{1}{4} | \eta_x+2, \eta_y+2, j \rangle + (\eta_y+\frac{1}{2}) | \eta_x+2, \eta_y, j \rangle \} \\ & - (\eta_x+\frac{1}{2}) \{ \eta_y(\eta_y-1) | \eta_x, \eta_y-2, j \rangle + \frac{1}{4} | \eta_x, \eta_y+2, j \rangle + (\eta_y+\frac{1}{2}) \\ & | \eta_x, \eta_y, j \rangle \} + \sqrt{\rho_j} \delta_b \{ \eta_x(\eta_x-1) (2\eta_y | \eta_x-2, \eta_y-1, j \rangle \\ & + | \eta_x-2, \eta_y+1, j \rangle) + \frac{1}{4} (2\eta_y | \eta_x+2, \eta_y-1, j \rangle + | \eta_x+2, \eta_y+1, j \rangle \\ & - (\eta_x+\frac{1}{2}) (2\eta_y | \eta_x, \eta_y-1, j \rangle + | \eta_x, \eta_y+1, j \rangle) \} + \delta_b^2 \{ \eta_x(\eta_x-1) \\ & | \eta_x-2, \eta_y, j \rangle + \frac{1}{4} | \eta_x+2, \eta_y, j \rangle - (\eta_x+\frac{1}{2}) | \eta_x, \eta_y, j \rangle \} \quad (17) \end{aligned}$$

$$\text{B.9): } \quad \underline{x_\ell y_\ell \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} | \eta_x, \eta_y, j \rangle}$$

Aus den Gleichung(15) erhalten wir:

$$\begin{aligned} x_\ell y_\ell \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} | \eta_x, \eta_y, j \rangle &= \eta_x(\eta_x-1) \{ \eta_y(\eta_y-1) | \eta_x-2, \eta_y-2, j \rangle \\ &- \frac{1}{2} | \eta_x-2, \eta_y, j \rangle - \frac{1}{4} | \eta_x-2, \eta_y+2, j \rangle \} - \frac{1}{2} \{ \eta_y(\eta_y-1) \\ &| \eta_x, \eta_y-2, j \rangle - \frac{1}{2} | \eta_x, \eta_y, j \rangle - \frac{1}{4} | \eta_x, \eta_y+2, j \rangle \} \\ &- \frac{1}{4} \{ \eta_y(\eta_y-1) | \eta_x+2, \eta_y-2, j \rangle - \frac{1}{2} | \eta_x+2, \eta_y, j \rangle \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{4} |n_x+2, n_y+2, j\rangle\} + \sqrt{\rho_j} \delta_b \{ n_x(n_x-1) (n_y |n_x-2, n_y-1, j\rangle \\
 & -\frac{1}{2} |n_x-2, n_y+1, j\rangle) -\frac{1}{2} (n_y |n_x, n_y-1, j\rangle -\frac{1}{2} |n_x, n_y+1, j\rangle) \\
 & -\frac{1}{4} (n_y |n_x+2, n_y-1, j\rangle -\frac{1}{2} |n_x+2, n_y+1, j\rangle) \} + \sqrt{\rho_j} \delta_a \cdot \\
 & \{ n_y(n_y-1) (n_x |n_x-1, n_y-2, j\rangle -\frac{1}{2} |n_x+1, n_y-2, j\rangle \\
 & -\frac{1}{2} (n_x |n_x-1, n_y, j\rangle -\frac{1}{2} |n_x+1, n_y, j\rangle) -\frac{1}{4} (n_x |n_x-1, n_y+2, j\rangle \\
 & -\frac{1}{2} |n_x+1, n_y+2, j\rangle) \} + \rho_j \delta_a \delta_b \{ n_x n_y |n_x-1, n_y-1, j\rangle \\
 & -\frac{1}{2} n_x |n_x-1, n_y+1, j\rangle -\frac{1}{2} |n_x+1, n_y-1, j\rangle +\frac{1}{4} |n_x+1, n_y+1, j\rangle \quad (18)
 \end{aligned}$$

Anhang (C)
=====

Berechnung der Matrixelemente $\langle \tilde{n}_x, \tilde{n}_y, i | C_\ell | n_x, n_y, j \rangle$

$$\langle \tilde{n}_x, \tilde{n}_y, i | C_\ell | n_x, n_y, j \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{1}{2} [\rho_i x_i^2 + \rho_j x_j^2]} \frac{H_{\tilde{n}_x}(\sqrt{\rho_i} x_i)}{H_{n_x}(\sqrt{\rho_i} x_i)} \frac{H_{\tilde{n}_y}(\sqrt{\rho_j} x_j)}{H_{n_y}(\sqrt{\rho_j} x_j)} \cdot$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{1}{2} [\rho_i y_i^2 + \rho_j y_j^2]} \frac{H_{\tilde{n}_y}(\sqrt{\rho_i} y_i)}{H_{n_y}(\sqrt{\rho_i} y_i)} \frac{H_{\tilde{n}_x}(\sqrt{\rho_j} y_j)}{H_{n_x}(\sqrt{\rho_j} y_j)}$$

mit : $x_n = x - a_n$ und $y_n = y - b_n$

(a, b) sind die X-Y Koordinaten des n-ten Zentrums; die C_ℓ , $\ell=1,2,3$ sind in den einzelnen Bereichen Konstanten; sie können jedoch zwischen den einzelnen Bereichen verschieden sein. Mit Hilfe der Formel

$$H_n[\alpha_i(x-a_i)]$$

$$= n! \sum_{m=0}^{[n/2]} \sum_{k=0}^{n-2m} (-1)^k \frac{(2\alpha_i)^{n-2m} (-a_i)^{n-2m-k}}{(n-2m-k)! m! k!} x^k$$

$$= \sum_{\ell=0}^n A(n, i, \ell) x^\ell \quad (2)$$

können wir die Integranden, die Produkte zweier Hermite-Polynome sind, wie folgt schreiben

$$H_{n'_x}(\sqrt{\rho_x} x_i) H_{n_x}(\sqrt{\rho_x} x_j) = \sum_{K_x=0}^{n'_x+n_x} A_x(n'_x, i; n_x, j; K_x) X^{K_x}$$

und

$$H_{n'_y}(\sqrt{\rho_y} y_i) H_{n_y}(\sqrt{\rho_y} y_j) = \sum_{K_y=0}^{n'_y+n_y} A_y(n'_y, i; n_y, j; K_y) Y^{K_y} \quad (3)$$

Setzen wir diese Gleichungen oben ein, erhalten wir:

$$\langle n'_x, n'_y, i | C_l | n_x, n_y, j \rangle = \left[A_x(n'_x, i; n_x, j; K_x) \right] \left[A_y(n'_y, i; n_y, j; K_y) \cdot \right. \\ \left. \cdot J(K_x, K_y, i, j) \right] \quad (4)$$

mit:

$$J(K_x, K_y, i, j) = \int_{-\infty}^{+\infty} X^{K_x} e^{-\frac{1}{2}(\rho_x x_i^2 + \rho_x x_j^2)} \int_{-\infty}^{+\infty} Y^{K_y} e^{-\frac{1}{2}(\rho_y y_i^2 + \rho_y y_j^2)} C_l dy dx \quad (5)$$

Da die Konstanten C_l in den einzelnen Bereichen verschieden sein können, müssen wir die Doppelintegrale $J(K_x, K_y, i, j)$ nach dx und dy wie folgt zerlegen:

$$J(K_x, K_y, i, j) = C_1 \int_{-\infty}^0 dx F(x) \int_{-\infty}^{S_1 x} dy F(y) + C_2 \left\{ \int_{-\infty}^0 dx F(x) \int_{S_1 x}^{\infty} dy F(y) \right. \\ \left. + \int_0^{\infty} dx F(x) \int_{S_2 x}^{\infty} dy F(y) \right\} + C_3 \int_0^{\infty} dx F(x) \int_{-\infty}^{S_2 x} dy F(y) \quad (6)$$

Mit Hilfe der Transformationen

$$C_x = \frac{a_i \rho_i + a_j \rho_j}{\sqrt{2} \rho}, \quad C_y = \frac{b_i \rho_i + b_j \rho_j}{\sqrt{2} \rho}, \quad \rho = \sqrt{\rho_i + \rho_j}$$

und unter Verwendung des Binominal-Lehrsatzes

$$(x+a)^n = n! \sum_{\alpha=0}^n \frac{a^{n-\alpha}}{(n-\alpha)! \alpha!} x^\alpha$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} J(k_x, k_y, i, j) &= \left(\frac{\sqrt{2}}{\rho}\right)^{k_x+k_y+2} e^{-\frac{1}{2} D^2} \sum_{\alpha=0}^{k_x} \frac{k_x! C_x^{k_x-\alpha}}{(k_x-\alpha)! \alpha!} \sum_{\beta=0}^{k_y} \frac{k_y! C_y^{k_y-\beta}}{(k_y-\beta)! \beta!} \\ &\left[C_1 \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-u^2} u^\alpha \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{-v^2} v^\beta + C_2 \{ (-1)^\beta \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-u^2} u^\alpha \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{-v^2} v^\beta \right. \\ &\left. + (-1)^\alpha \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-u^2} u^\alpha \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{-v^2} v^\beta \right] + C_3 \{ (-1)^\alpha \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-u^2} u^\alpha \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{-v^2} v^\beta \} \\ &\left. + C_4 \{ (-1)^\beta \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-u^2} u^\alpha \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{-v^2} v^\beta \} \right] \end{aligned}$$

Dabei ist

(7)

$$D = \frac{\sqrt{\rho_i \rho_j (\delta_x^2 + \delta_y^2)}}{\rho}, \quad \delta_x = a_i - a_j, \quad \delta_y = b_i - b_j \quad (8)$$

Die in (7) auftretenden Integrale haben die Form:

$$I_m = \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-u^2} u^\alpha \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{-v^2} v^\beta, \quad m = 1, 2, 3, 4$$

Die Konstanten g_m, C_m und d_m sind in der folgenden Tabelle (2) definiert.

m	g_m	C_m	d_m
1	$-C_x$	$+S_1$	$+S_1 C_x - C_y$
2	$-C_x$	$-S_1$	$-S_1 C_x - C_y$
3	$+C_x$	$+S_2$	$+S_2 C_x - C_y$
4	$+C_x$	$-S_2$	$-S_2 C_x - C_y$

Tabelle 2

Um I_m zu berechnen, verwenden wir folgendes Integral (34)

$$\begin{aligned}
 \int x^n e^{-x^2} dx &= -\frac{1}{2} x^{n-1} e^{-x^2} + \frac{n-1}{2} \int e^{-x^2} x^n dx \\
 &= -e^{-x^2} \sum_{\nu=0}^{m-1} \frac{(n-1-2\nu)}{2^{\nu+1}} x^{n-2\nu-1} \\
 &\quad + (1-z) \frac{\pi(1/2; m)}{2^{m+1}} \phi(x) + C
 \end{aligned} \tag{9}$$

mit $m = (n+z)/2$, $z = \begin{cases} 0 & \text{für gerade } n \\ 1 & \text{für ungerade } n \end{cases}$

$$(k; d; \mu) = k(k+d)(k+2d)\dots\dots(k+(\mu-1)d)$$

$\phi(x)$ stellt die Fehlerfunktion dar

$$\phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$

mit den Eigenschaften:

$$\phi(x) = -\phi(-x) \quad , \quad \phi(0) = 0 \quad , \quad \phi(\infty) = 1$$

Das innere Integral von I_m ist:

$$\int_{-\infty}^{cu+d} dv e^{-v^2} v^{\beta} = e^{-\frac{(cu+d)^2}{2}} \sum_{\nu=0}^{m_{\beta}-1} \frac{(\beta-1; -2; \nu)}{2^{\nu+1}} (cu+d)^{\beta-2\nu-1} + (1-Z_{\beta}) \frac{\sqrt{\pi} (1; 2; m_{\beta})}{2^{m_{\beta}+1}} [\phi(cu+d) + 1] \quad (10)$$

Entwickeln wir den Term $(cu+d)^{\beta-2\nu-1}$ nach dem Binominal-Lehrsatz, erhalten wir:

$$\int_{-\infty}^{cu+d} dv e^{-v^2} v^{\beta} = -e^{-\frac{(cu+d)^2}{2}} \sum_{\nu=0}^{m_{\beta}-1} A_{\nu}(\beta) \sum_{\mu=0}^{\beta-2\nu-1} A_{\mu}(\beta, \nu) u^{\mu} + (1-Z_{\beta}) E_{\beta} [\phi(cu+d) + 1] \quad (11)$$

mit:

$$A_{\nu}(\beta) = \frac{(\beta-1; -2; \nu)}{2^{\nu+1}}$$

$$E_{\beta} = \frac{\sqrt{\pi} (1; 2; m_{\beta})}{2^{m_{\beta}+1}}$$

$$A_{\mu}(\beta, \nu) = \frac{(\beta-2\nu-1)!}{(\beta-2\nu-\mu-1)! \mu!} C^{\mu} d^{\beta-2\nu-\mu-1}$$

$$m_{\beta} = (\beta+2)/2 \quad , \quad Z_{\beta} = \begin{cases} 0 & \text{für gerade } \beta \\ 1 & \text{für ungerade } \beta \end{cases}$$

Nach dem Einsetzen von (11) in (8) ergibt sich das Integral I_m wie folgt:

$$I_m = - \sum_{\nu=0}^{m_\beta-1} A_\nu(\beta) \sum_{\mu=0}^{\beta-2\nu-1} A_\mu(\beta, \nu) \int_{-\infty}^g e^{-\frac{(cu+d)^2 - u^2}{u^{\alpha+\mu}}} du + (1-z_\beta) E_\beta \int_{-\infty}^g e^{-u^2} u^\alpha [\phi(cu+d)] du \quad (12)$$

Durch die Transformation

$$\eta = Fu + \frac{cd}{F} \quad , \quad F = \sqrt{c^2+1}$$

erhalten wir das erste Integral

$$\int_{-\infty}^g e^{-\frac{(cu+d)^2 - u^2}{u^{\alpha+\mu}}} du = \sum_{\pi=0}^{\alpha+\mu} A_\pi(\alpha, \mu) \cdot J(Fg + \frac{cd}{F}; \pi)$$

mit

$$A_\pi(\alpha, \mu) = \frac{(\alpha+\mu)! e^{-\frac{d^2}{F^2}}}{\pi! (\alpha+\mu-\pi)!} (-cd)^{\alpha+\mu-\pi} \left(\frac{1}{F}\right)^{2(\alpha+\mu)-\pi+1},$$

wobei wir wieder den Binominal-Lehrsatz verwendet haben.

$$J(x, n) = \int_{-\infty}^x e^{-t^2} t^n dt$$

ist durch Gleichung (7) gegeben.

Mittels partieller Integration und unter Verwendung derselben Transformation läßt sich das zweite Integral von (12) berechnen:

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^g e^{-u^2} u^{\alpha} [\phi(cu+d)+1] = [\phi(cg+d)+1] \cdot J(g, \alpha) \\
 & + \frac{2c}{\sqrt{\pi}} \left[\sum_{\nu=0}^{m_{\alpha}-1} A_{\nu}(\alpha) \sum_{\pi=0}^{\alpha-2\nu-1} A_{\pi}(\alpha, \nu) \cdot J\left(Fg + \frac{cd}{F}, \pi\right) \right. \\
 & \left. - (1-z_{\alpha}) A_{\alpha} \cdot IN \right] \tag{13}
 \end{aligned}$$

mit:

$$IN = \int_{-\infty}^g e^{-\frac{(cu+d)^2}{c^2}} [\phi(u)+1]$$

$$m_{\alpha} = (\alpha + z_{\alpha})/2, \quad z = \begin{cases} 0 & \text{für gerade } \alpha \\ 1 & \text{für ungerade } \alpha \end{cases}$$

Das Integral IN wird numerisch berechnet.

Anhang (D)

Integrale zur Volumenerhaltung:

In diesem Anhang werden Integrale des Typs berechnet, die bei der Bestimmung der Volumina V_1 , V_2 , V_2' und V_3 zur Volumenerhaltung auftreten:

$$D.1) \quad I_1 = \int_F^g (sx+d) \sqrt{ax^2+bx+c} \, dx \quad , \quad a < 0 \quad (1)$$

Die Substitution $y=sx+d$ führt auf die Form

$$I_1 = \frac{1}{s^2} \int_{sF+d}^{sg+d} y \sqrt{ay^2 + (bs-2ad)y + ad^2 - bsd + cs^2} \, dy \quad (2)$$

Verwenden wir folgendes Integral (33)

$$\int x \sqrt{X} \, dx = \frac{X\sqrt{X}}{3a} - \frac{b(2ax+b)}{8a^2} \sqrt{X} + \frac{1}{\sqrt{-a}} \frac{b(4ac-b^2)}{16a^2} \cdot \arcsin \frac{2ax+b}{\sqrt{b^2-4ac}} \quad (3)$$

mit

$$X = ax^2+bx+c \quad , \quad a < 0 \quad , \quad 4ac-b^2 < 0$$

so erhalten wir nach dem Einsetzen in (3)

$$I_1 = \frac{1}{s^2} \left[\sqrt{ay^2+b'y+c'} \left(\frac{ay^2+b'y+c'}{3a} - \frac{b(2ay+b')}{8a^2} \right) + \frac{1}{\sqrt{-a}} \frac{b'(4ac'-b'^2)}{16a^2} \arcsin \frac{2ay+b'}{\sqrt{b'^2-4ac'}} \right] \Bigg|_{sF+d}^{sg+d} \quad (4)$$

mit

$$b' = bs-2ad \quad \text{und} \quad c' = ad^2 - bsd + cs^2$$

$$D.2) \quad I_2 = \int_F^g (r^2 - x^2) \arcsin \frac{a}{\sqrt{r^2 - x^2}} dx \quad (5)$$

Partielle Integration liefert den Ausdruck:

$$I_2 = \left| (r^2 x - \frac{x^3}{3}) \arcsin \frac{a}{\sqrt{r^2 - x^2}} \right|_F^g - \frac{1}{3} a \int_F^g \frac{x (3r^2 x - x^3)}{(r^2 x^2) \sqrt{r^2 - a^2 - x^2}} dx \quad (6)$$

Das Integral

$$Y = \int_F^g \frac{x (3r^2 x - x^3)}{(r^2 x^2) \sqrt{r^2 - a^2 - x^2}} dx$$

läßt sich wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} Y &= \int_F^g \frac{x^2 - 2r^2}{\sqrt{r^2 - a^2 - x^2}} dx + 2r^4 \int_F^g \frac{dx}{(r^2 x^2) \sqrt{r^2 - a^2 - x^2}} \quad (7) \\ &= Y_1 + 2r^4 Y_2 \end{aligned}$$

Unter Verwendung der Formeln (33)

$$\int \frac{x^2}{\sqrt{a^2 - x^2}} dx = -\frac{x}{2} \sqrt{a^2 - x^2} + \frac{a^2}{2} \arcsin \frac{x}{a} \quad (8)$$

$$\int \frac{dx}{\sqrt{a^2 - x^2}} = \arcsin \frac{x}{a}$$

erhalten wir für Y_1 in (7)

$$Y_1 = -\frac{1}{2} \left| x \sqrt{r^2 - a^2 - x^2} + (a^2 + 3r^2) \arcsin \frac{x}{\sqrt{r^2 - a^2}} \right|_F^g \quad (9)$$

Wegen
$$\frac{1}{r^2 - x^2} = \frac{1}{2r} \left[\frac{1}{r-x} - \frac{1}{r+x} \right]$$

ergibt sich Y_2 in (7) zu

$$Y_2 = \frac{1}{2r} \left[\int_F^g \frac{dx}{(r-x)\sqrt{r^2 - a^2 - x^2}} + \int_F^g \frac{dx}{(r+x)\sqrt{r^2 - a^2 - x^2}} \right] \quad (10)$$

Durch die Substitution $\rho = r-x$ bzw. $\rho = r+x$ erhalten wir:

$$Y_2 = \frac{1}{2r} \left[\int_{r-g}^{r+f} \frac{d\rho}{\rho \sqrt{-\rho^2 + 2r\rho - a^2}} - \int_{r-f}^{r+g} \frac{d\rho}{\rho \sqrt{-\rho^2 + 2r\rho - a^2}} \right] \quad (11)$$

Schließlich ergibt sich das gesuchte Integral I_2 (5) zu:

$$\begin{aligned} I_2 = \frac{1}{3} & \left[\left| x(3r^2 - x^2) \arcsin \frac{a}{\sqrt{r^2 - x^2}} + \frac{1}{2} a (x\sqrt{r^2 - a^2 - x^2} \right. \right. \\ & + (a^2 + 3r^2) \arcsin \frac{x}{\sqrt{r^2 - a^2}} \Big|_F^g - r^3 \left\{ \left| \arcsin \frac{rx - a^2}{x\sqrt{r^2 - a^2}} \right|_{r-g}^{r+g} \right. \\ & \left. \left. - \left| \arcsin \frac{rx - a^2}{x\sqrt{r^2 - a^2}} \right|_{r-f}^{r+f} \right\} \right] \quad (12) \end{aligned}$$

D.3)
$$I_3 = \int_F^g (r^2 - x^2) \arcsin \frac{sx + d}{\sqrt{r^2 - x^2}} dx$$

Integrieren wir partiell, erhalten wir:

$$I_3 = \frac{1}{3} \left| x(3r^2 - x^2) \arcsin \frac{sx + d}{\sqrt{r^2 - x^2}} \right|_F^g - \frac{1}{3} \int_F^g \frac{x(3r^2 - x^2)(dx + sr^2)}{(r^2 - x^2)\sqrt{-(1+s^2)x^2 - 2sdx + r^2 - d^2}} dx \quad (13)$$

Das Integral auf der rechten Seite der Gleichung (13) läßt sich wie folgt schreiben:

$$Y = \int_F^g \frac{dx + sr^2 - 2dr^2}{\sqrt{-(1+s^2)x^2 - 2sdx + r^2 - d^2}} dx + 2r^4 \int_F^g \frac{sx+d}{(r^2-x^2)\sqrt{-(1+s^2)x^2 - 2sdx + r^2 - d^2}} dx$$

$$= Y_1 + 2r^4 Y_2 \quad (14)$$

Unter Verwendung der Formeln:

$$\int \frac{x^2}{\sqrt{X}} dx = \left(\frac{x}{2a} - \frac{3b}{4a^2} \right) \sqrt{X} + \frac{3b^2 - 4ac}{8a^2} \int \frac{1}{\sqrt{X}} dx$$

$$\int \frac{x}{\sqrt{X}} dx = \frac{\sqrt{X}}{a} - \frac{b}{2a} \int \frac{1}{\sqrt{X}} dx \quad (15)$$

$$\int \frac{1}{\sqrt{X}} dx = -\frac{1}{\sqrt{-a}} \arcsin \frac{2ax+b}{\sqrt{b^2-4ac}}$$

mit $X = ax^2 + bx + c$, $a < 0$, $4ac - b^2 < 0$

erhalten wir

$$Y_1 = \left| \sqrt{ax^2 + bx + c} \left\{ \frac{d(2ax-3b)}{4a^2} + \frac{sr^2}{a} \right\} + \left\{ \frac{d(3b^2-4ac)}{8a^2} - \frac{bsr^2}{2a} - 2dr^2 \right\} \frac{1}{\sqrt{-a}} \arcsin \frac{2ax+b}{\sqrt{b^2-4ac}} \right|_F^g \quad (16)$$

mit $a = -(1+s^2)$, $b = -2sd$ und $c = r^2 - d^2$

Das Integral in (14)

$$Y_2 = \int_F^g \frac{sx+d}{(r^2-x^2)\sqrt{ax^2+bx+c}} dx \quad (17)$$

ergibt sich wegen

$$\frac{SX+d}{r^2-x^2} = \frac{1}{2r} \left[\frac{d+sr}{r-x} + \frac{d-sr}{r+x} \right]$$

zu

$$Y_2 = \frac{1}{2r} \left[(d+sr) \int_F^g \frac{dx}{(r-x)\sqrt{ax^2+bx+c}} + (d-sr) \int_F^g \frac{dx}{(r+x)\sqrt{ax^2+bx+c}} \right] \quad (18)$$

Durch die Substitution $\rho=(r-x)$ bzw. $\rho=(r+x)$ erhalten wir:

$$Y_2 = \frac{1}{2r} \left[(d+sr) \int_{r-F}^{r+g} \frac{-d\rho}{\rho \sqrt{a\rho^2 - (2ar-b)\rho + (d-sr)^2}} + (d-sr) \int_{r+F}^{r+g} \frac{d\rho}{\rho \sqrt{a\rho^2 - (2ar-b)\rho - (d-sr)^2}} \right] \quad (19)$$

Unter Verwendung von

$$\int \frac{dx}{x\sqrt{X}} = \frac{1}{\sqrt{-c}} \arcsin \frac{bx+2c}{x\sqrt{b^2-4ac}} ,$$

$$, X = ax^2+bx+c , c < 0 , 4ac - b^2 < 0 \quad (20)$$

folgt für Y_2 in (14)

$$Y_2 = \frac{1}{2r} \left[-\operatorname{sign}(d+sr) \left| \arcsin \frac{b_1x+2c_1}{x\sqrt{b_1^2-4ac_1}} \right|_{r-F}^{r-g} + \operatorname{sign}(d-sr) \left| \arcsin \frac{b_2x+2c_2}{x\sqrt{b_2^2-4ac_2}} \right|_{r+F}^{r+g} \right] \quad (21)$$

mit

$$\begin{aligned} b_1 &= -(2ar+b) , & b_2 &= -(2ar-b) \\ c_1 &= -(d+sr)^2 , & c_2 &= -(d-sr)^2 \end{aligned}$$

Schließlich erhalten wir für das gesuchte Integral I_3 (13):

$$I_3 = \frac{1}{3} \left[\left| x(3r^2 - x^2) \arcsin \frac{5x+d}{\sqrt{r^2-x^2}} \right|_F^g - (Y_1 + 2r^4 Y_2) \right] \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \text{D.4) } I_4 &= \int_F^g \sqrt{a^2 - x^2} \, dx \\ &= \frac{1}{2} \left[x \sqrt{a^2 - x^2} - a^2 \arcsin \frac{x}{a} \right]_F^g \end{aligned} \quad (23)$$

$$\text{D.5) } I_5 = \int_F^g (r^2 - x^2) \, dx = r^2(g-F) - \frac{1}{3}(g^3 - F^3) \quad (24)$$

Literaturverzeichnis

- 1) O. Hahn und F. Straßmann, Naturwissenschaften 27 (1939) 11 und 89
- 2) N. Bohr und A. Wheeler, Phys.Rev. 56 (1939) 426
- 3) S.G. Nilsson, Mat.Fys.Medd.Dan.vid.Selsk 29 no, 16 (1955)
- 4) E. Merzbacher, Quantum Mechanics.pp. 64-77 (wiley,N.Y.1961)
- 5) N.A. Cherdantsev and V.E. Marshalkin, Bull.Acad.Sci:USSR 30 (1966), transl. (1967)
- 6) M. Demeur et G. Reidemeister, Ann.Phys. (France), t.1 (1967), 181
- 7) P. Holzer, U. Mosel und W. Greiner, Nucl.phys. A138 (1969), 241
P. Holzer, Diplomarbeit, Universität Frankfurt/Main 1969
- 8) D. Scharnweber, U. Mosel und W. Greiner, Phys.Lett. 24 (1970) 601
D. Scharnweber, Doktorarbeit, Universität Frankfurt/Main 1970
- 9) D. Scharnweber, W. Greiner und U. Mosel, Nucl.Phys. A164 (1971), 257
- 10) J. Maruhn, Diplomarbeit, Universität Frankfurt/Main 1971
J. Maruhn, W. Greiner, Z.Physik 251 (1972) 431
- 11) J. Maruhn, Doktorarbeit, Universität Frankfurt/Main 1973
J. Maruhn, und W. Greiner, Phys.Rev.Lett. 32 (1974) 548
- 12) H.J. Fink, J. Maruhn, W. Scheid und W. Greiner, Z.Phys. 268 (1974) 321
- 13) R.O. Present, J.K. Knipp, Phys.Rev. 57, 1940, 1188
- 14) W.J. Swiatecki, Second UN Internat.Conf.on the peaceful uses of Atomic Energie, Geneva 1958, p.651
- 15) S.T. Tsien et al., J.Phys.Radium, 8, 1947, 165
- 16) R. Brandt, Ang. Chemie, 24, 1971, 1000
- 17) I. Halpern, Ann.Rev.Nucl.Sci. 21, 1971, 245

- 18) R.H. Iyer und J.W. Cobble, Phys.Rev.Lett. 17 (1966) 541
- 19) R.H. Iyer und J.W. Cobble, Phys.Rev. 172, (1968) 1190
- 20) V.P. Pavelygin, N.H. Shadieva, S.P. Tretiakova, A.H. Boos
R. Brandt, Nucl.Phys. A127 (1969) 577
- 21) R.L. Fleischer, P.B. Price, R.M. Walker und E.L. Hubbard,
Phys.Rev. 143, (1966) 943
- 22) J. Grumann, U. Mosel, B. Fink, W. Greiner, Z.Physik 288
(1969) 371
- 23) H. Diehl, Doktorarbeit, Universität Frankfurt/Main 1973
H. Diehl und W. Greiner, Nucl.Phys. A229 (1974) 29
- 24) H.J. Scheefer, Diplomarbeit, Universität Frankfurt/Main 197
- 25) P. Bergmann, Diplomarbeit, Universität Frankfurt/Main 1972
P. Bergmann, H.J. Scheefer, Z.Naturf. 29a (1974) 1003
- 26) H.J. Lustig, Diplomarbeit, Universität Frankfurt/Main 1973
- 27) J. Hahn, Diplomarbeit, Universität Frankfurt/Main 1975
J. Hahn, H.J. Lustig, und W. Greiner, Z.Naturf. 32a
(1977) 215
- 28) A.R. Degheidy, J. Maruhn, und W. Greiner, Verhandl. OPG(VI)
13 (1978) 781
- 29) M. Abramowitz und J.A. Stegun, Handbook of Mathematical
functions, (Dover Publications, N.Y. 1965
- 30) P.T. Ong, Diplomarbeit, Universität Frankfurt/Main 1974
P.T. Ong, und W. Scheid, Z.Naturf. 30a (1975) 406
- 31) C. Gustafsson, Proc.Int.Conf.on the properties of Nuclei
far from the Region of Beta-Stability, Leysin 1970
(CERN 70 - 30, Geneve 197)S. 654
- 32) Eisenberg, Greiner, Nuclear Theory Bd. 1
- 33) Branstein-Semendjajew/Taschenbuch der Mathematik
- 34) Gröbner und Hofseiter, Integraltafel I
- 35) U. Götz, H.C. Pauli und K. Alder, Nucl.Phys. A175 (1971) 4
- 36) H. Friedrich, L. Satpathy und A. Weiguny, Phys.Lett.
36B (1971) 189

- 37) W.M. Stutinsky, Nucl.Phys. A122 (1968) 1
- 38) D.M. Brink, International School of Physics "Enrico Fermi",
XXXVI (1966) 247
- 39) Y. Abe, J. Hinra und H. Tanaka, Prog.Theory Phys. 49
(1973) 800
- 40) T. Morović, Doktorarbeit, Universität Frankfurt/Main 1973
- 41) U. Mosel, J. Maruhn und W. Greiner, Phys.Lett. 34B (1971) 587
- 42) J.A. Maruhn, private Mitteilung

Beschreibung der Abbildungen

Abb. 1) Energie in Abhängigkeit vom Spaltparameter X bzw. die beim Zerfall eines Kernes aus A Nukleonen und Z Protonen in n gleich schwere und unendlich weit getrennte Fragmente frei wird. Die Energien sind nach dem Flüssigkeitstropfen-Modell berechnet. Für $Z^2/A < 30.5$ ist die Spaltung in zwei, für $30.5 \leq Z^2/A \leq 43.3$ in drei und für $Z^2/A > 43.3$ ist die Spaltung in vier Fragmente energetisch am günstigsten (14).

Abb. 2) Anregungsfunktion einiger Spaltprodukte für die Reaktion ${}^4\text{He} + {}^{238}\text{U}$. Es handelt sich hier um ganz leichte Spaltprodukte wie ${}^{24}\text{Na}$, ${}^{28}\text{Mg}$, ${}^{38}\text{S}$, die nicht aus einer stark asymmetrischen binären Kernspaltung stammen können. σ Wirkungsquerschnitt, E Bombardierungsenergie (18).

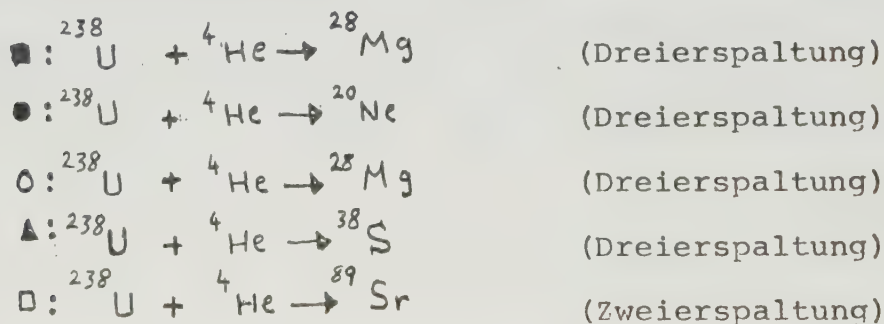


Abb. 3) Spaltprodukt-Massenverteilung für die Reaktion ${}^{238}\text{U} + 39\text{-Mev-}{}^4\text{He}$. (18)

Φ : direkt gemessene Werte; Φ : reflektierte Werte unter der Annahme einer binären Kernspaltung. Die leichten Fragmente im Massenbereich $20 < A \leq 60$ werden viel häufiger gebildet als die schweren mit $A \approx 190$. Die relative Häufigkeit der ganz leichten Fragmente ist ein Beweis für die Dreifachspaltung.

Abb. 4) Abhängigkeit des Verhältnisses $\sigma(\tau)/\sigma(\theta)$ von der Energie der Argon-Ionen für verschiedene Targets.

$\sigma(\tau)$ = Wirkungsquerschnitt für Dreifachspaltung

$\sigma(\theta)$ = Wirkungsquerschnitt für Zweifachspaltung

Es bedeuten $\square$: U, $\square$: Th, ∇ : Bi, $\bullet$: Au in 2π -Geometrie;

$\blacksquare$: Th, ∇ : Pb in 4π - Geometrie gemessen. (26)

Abb. 5) Schematische Darstellung der Möglichkeiten eines Kerns, in drei Fragmente zu spalten.

Abb. 6) Barrierenhöhen für prolata und oblate Dreifachspaltung in Einheiten der Oberflächenenergie. Die prolata Barrieren liegen durchweg niedriger. Für $x = 0$ wird die Deformationsenergie dreier sich berührender Kugeln erreicht. Da die Coulombenergie dort verschwindet, gehen die oblate und prolata Kurve ineinander über (23).

Abb. 7) Kernformen im symmetrischen Dreizentrenoszillator-schalenmodell für verschiedene Werte des Öffnungswinkels ϕ . Sie entsprechen dem Aufbruch eines Kerns in drei gleiche Fragmente. Für $\phi = 180^\circ$ ergibt sich der Spezialfall einer prolata Konfiguration.

Abb. 8) Kernformen im asymmetrischen Dreizentrenoszillatorschalenmodell für verschiedene Werte des Öffnungswinkels ϕ . Sie entsprechen dem Aufbruch eines Kerns in drei verschiedene Fragmente; dabei können zwei Fragmente gleich sein.

Abb. 9) Darstellung des asymmetrischen Dreizentrenoszillators in der $z=0$ Ebene. Die drei Zentren befinden sich in dieser Ebene, die durch drei Geraden $y_1 = s_1 x$, $y_2 = s_2 x$ und durch die negative y-Achse in drei Bereiche geteilt wird. Die Geraden sind durch den Koordinatenursprung und durch die Schnittpunkte von je zwei Fragmenten definiert. a, a' bezeichnen Abstände der Zentren, ϕ_1, ϕ_2 entsprechende Öffnungswinkel.

Abb. 10) Wie Abb. 9), jedoch für den symmetrischen Dreizentrenoszillator, der Konfigurationen von drei gleichen Fragmenten beschreibt. Deshalb bilden die Zentren ein gleichschenkliges Dreieck und es gilt $a = a', \phi_1 = \phi_2$.

Abb. 11) Energieeigenwerte $\lambda = (n_x + n_y + 1)$ in dimensionslosen Koordinaten als Funktion des Abstandes a für 3 gleiche Fragmente ohne L_s - und L^2 -Term, $\phi = 60^\circ$. Den dick gezeichneten Kurven entsprechen zweifach entartete Zustände.

Abb. 12) Wie Abb. 11, jedoch für $\phi = 180^\circ$

Abb. 13) Wie Abb. 11) jedoch für sehr kleinen Winkel ϕ , $\phi = 3^\circ$. Für kleinen Abstand a ergibt sich das Spektrum des Zweizentrenoszillators, für großen Abstand a erhalten wir das Spektrum dreier getrennter Oszillatoren.

Abb. 14) Einteilchenenergien in MeV für ^{12}C als Funktion des Abstandes a für drei gleiche Fragmente ohne L_s und L^2 -Term, $\phi = 60^\circ$. Für die Grenzfälle $a=0$ und $a=\infty$ erhalten wir das Spektrum des sphärischen Oszillators mit den Hauptquantenzahlen $0, 1, 2, \dots$. Den dick gezeichneten Kurven entsprechen zweifach entartete Zustände.

Abb. 15) Wie Abb. 14), jedoch mit L_s und L^2 -Term. Die zweifach entarteten Zustände von Abb. 13 sind hier aufgespalten. Für die Grenzfälle $\alpha = 0$ und $\alpha = \infty$ erhalten wir das Spektrum des sphärischen Oszillators mit L_s und L^2 -Term.

Abb. 16) Wie Abb. 14, jedoch für $\phi = 150^\circ$

Abb. 17) Wie Abb. 16, jedoch mit L_s und L^2 -Term.

Abb. 18) Summe der Einteilchenenergien in [Mev] für ^{12}C in drei gleiche Fragmente als Funktion des Abstandes a , für $\phi = 60^\circ$. Die Figur zeigt die Kernform des ^{12}C bei der minimalen Energie von $a \approx 1.5 \text{ fm}$.

Abb. 19) Minimierte Summe der Einteilchenenergien in bezug auf Abstand a für ^{12}C in drei gleiche Fragmente als Funktion des Winkels ϕ in Mev. Die Figuren zeigen die Kernformen des ^{12}C , die den beiden Minima bei $\phi = 60^\circ$ $a \approx 1.5 \text{ fm}$ und $\phi = 150^\circ$, $a \approx .9 \text{ fm}$ entsprechen.

Abb. 20) Die obere Kurve zeigt die Schalenkorrekturen δU in Mev für ^{12}C im symmetrischen Fall in Abhängigkeit vom Abstand a und für $\phi = 60^\circ$. Die unteren Kurven stellen die Liquid-Drop Energie E_{LDM} nach Diehl und die Summe von E_{LDM} und δU in Mev dar, die ein Minimum bei etwa $a = 2.2 \text{ fm}$ hat.

Abb. 21) Bindungsenergie von ^{12}C in Mev als Funktion des Abstandes a für drei gleiche Fragmente, $\phi=60^\circ$, gestrichelt gezeichnet. Als Vergleich ist die Bindungsenergie von ^{12}C nach dem α -Teilchen Modell von Brink (38) und dem Molekular Orbital Modell von Y. Abe, J. Hiuro, H. Tanaka (39) eingezeichnet.

Abb. 22) Wie Abb. 20, jedoch für den superschweren Kern $^{396}_{150}\text{X}_{246}$ und den Aufbruch in drei gleiche Fragmente $^{396}_{150}\text{X}_{246} \rightarrow 3 \text{ } ^{132}_{50}\text{Sn}_{82}$. Die Figur zeigt die Kernform an der Barriere.

Abb. 23) Wie Abb. 22, jedoch Aufbruch in zwei gleiche Fragmente. λ gibt die Kernlänge in Einheiten des sphärischen Compoundkerns an, $\lambda = \frac{L}{2R_0}$.

Abb. 24) Einteilchenenergien in Mev für ^{20}Ne im asymmetrischen Dreizentrenoszillatorschalenmodell als Funktion des Abstandes a , bei festem Winkel ϕ , ohne Ls - und L^2 -Term. Dies entspricht asymptotisch dem Aufbruch von ^{20}Ne in ^{12}C und zwei α -Teilchen: $^{20}\text{Ne} \rightarrow ^{12}\text{C} + 2^4\text{He}$. Der Öffnungswinkel ϕ ist durch die Berührungskonfiguration $\odot$ gegeben, $\phi \approx 48^\circ$. Das Frequenzverhältnis $\omega_0(^{12}\text{C})/\omega_0(^4\text{He})$ ergibt sich asymptotisch zu: $\omega_0(^{12}\text{C}):\omega_0(^4\text{He})=1:1.4$. ω_0 ist die Kreuzfrequenz des entsprechenden sphärischen Oszillators. H. bzw. L stehen für schweres bzw. leichtes Fragment.

Abb. 25) Wie Abb. 24), jedoch mit Ls - und L^2 -Term.

Abb. 26) Wie Abb. 24), jedoch für $^{36}\text{Ar} \rightarrow 2 \text{ } ^{16}\text{O} + ^4\text{He}$, $\phi \approx 72^\circ$,
 $\omega_0(^{16}\text{O}):\omega_0(^4\text{He}) \approx 1:1.6$

Abb. 27) Wie Abb. 26, jedoch mit Ls - und L^2 -Term

Abb. 28) Wie Abb. 24, jedoch für den Fall $^{36}\text{Ar} \rightarrow ^8\text{Be} + ^{16}\text{O} + ^{12}\text{C}$
 $\phi \approx 55^\circ (\phi_1 \approx 24^\circ, \phi_2 \approx 31^\circ) \cdot \omega_0(^8\text{Be}) : \omega_0(^{16}\text{O}) : \omega_0(^{12}\text{C}) \approx 1.2 : 1 : 1.1$
 M steht für mittleres Fragment.

Abb. 29) Wie Abb. 28, jedoch mit Ls - und L^2 -Term.

Abb. 30) Minimierte Summe der Einteilchenenergien in bezug auf Abstand a für ^{36}Ar als Funktion des Winkels ϕ in Mev für folgende Konfigurationen



Die Figuren zeigen die Kernformen in den entsprechenden Minima.

Abb. 31) Anschauliche Darstellung der Größen, die bei der Volumenerhaltung im asymmetrischen Dreizentrenoszillatorschalenmodell auftreten.

Tabelle 3

Bereich 1	$-\infty \leq x \leq 0$, $-\infty \leq y \leq s_1 x$	8
Bereich 2	$-\infty \leq x \leq 0$, $s_1 x \leq y \leq \infty$	✓
	$0 \leq x \leq \infty$, $s_2 x \leq y \leq \infty$	N
Bereich 3	$0 \leq x \leq \infty$, $-\infty \leq y \leq s_2 x$	8 1

i	I	II	III
a_i	$-(a \sin \phi_1 + x_0)$	$-x_0$	$a' \sin \phi_2 - x_0$
b_i	$-(a \cos \phi_1 - \frac{c_2 + x_0 \sin \phi_1}{\cos \phi_1})$	$\frac{c_2 + x_0 \sin \phi_1}{\cos \phi_1}$	$-(a \cos \phi_1 - \frac{c_2 + x_0 \sin \phi_1}{\cos \phi_1})$

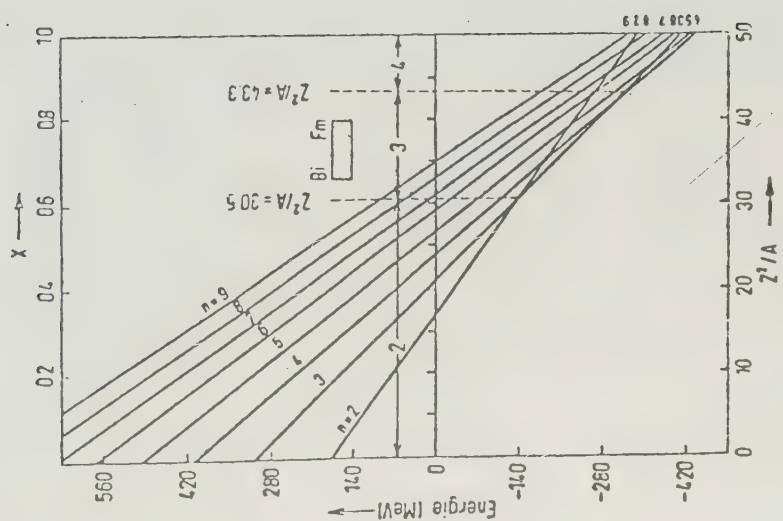


Abb.1

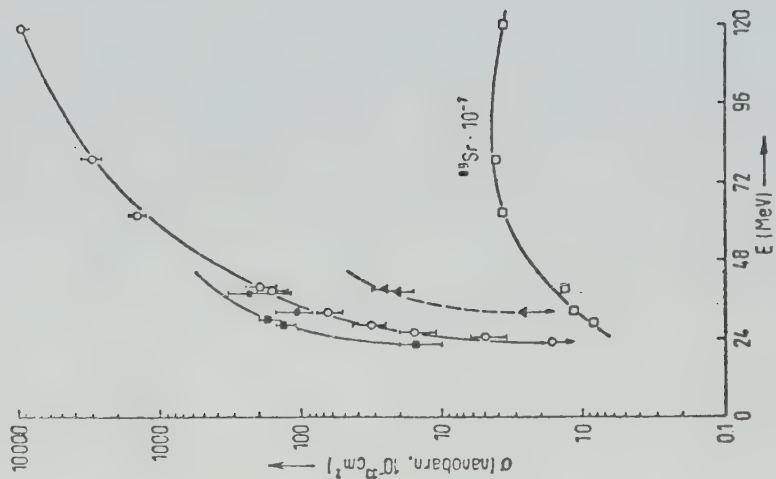


Abb.2

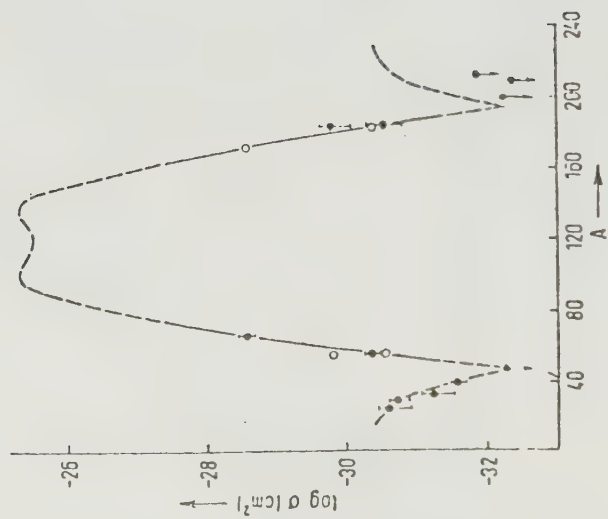


Abb. 3

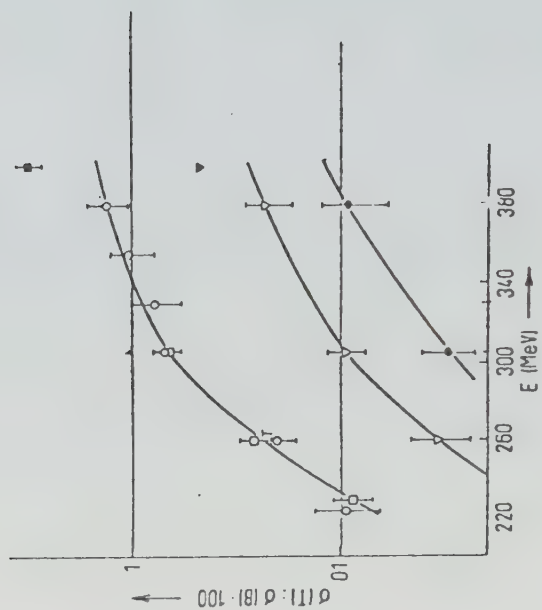


Abb. 4

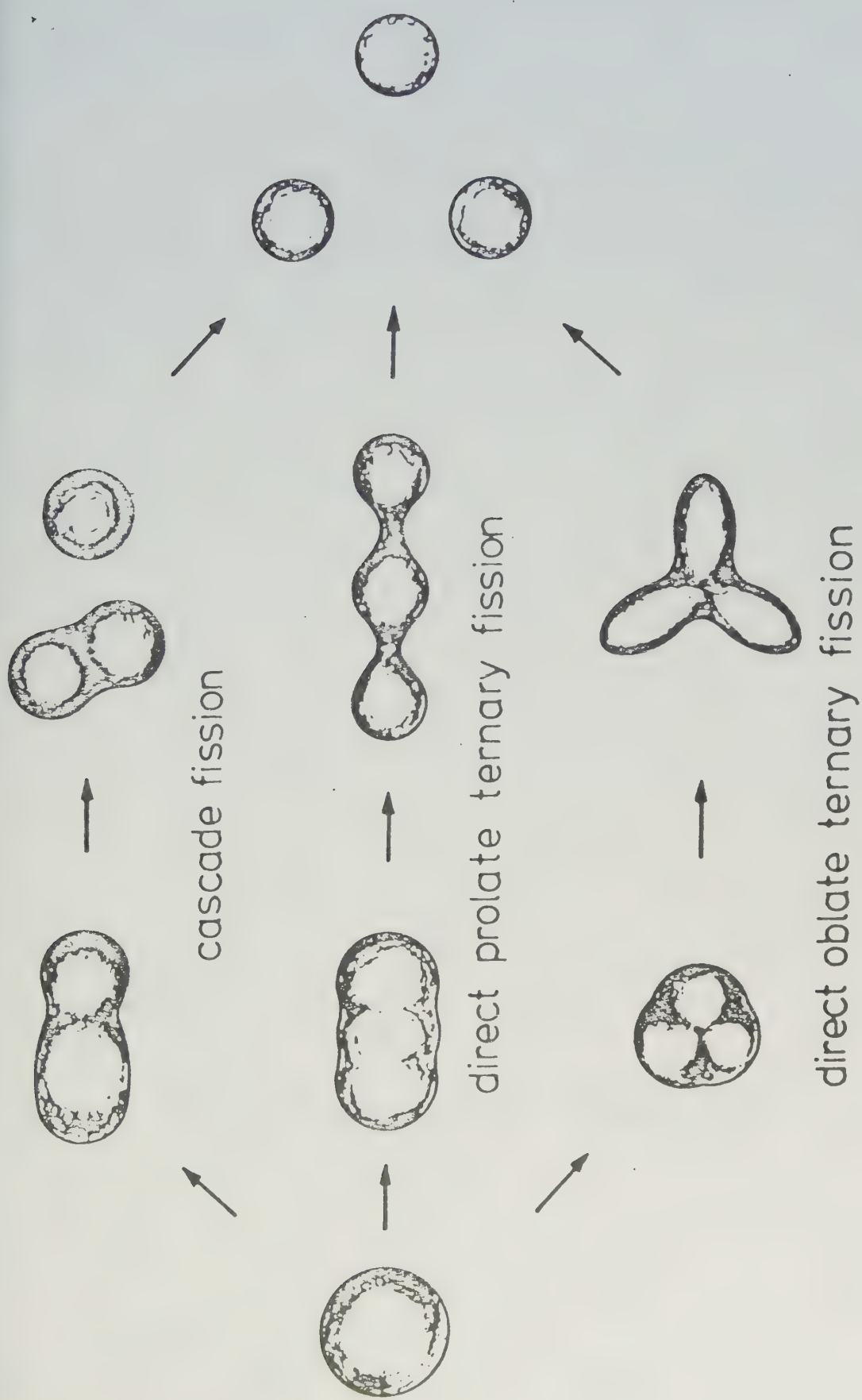
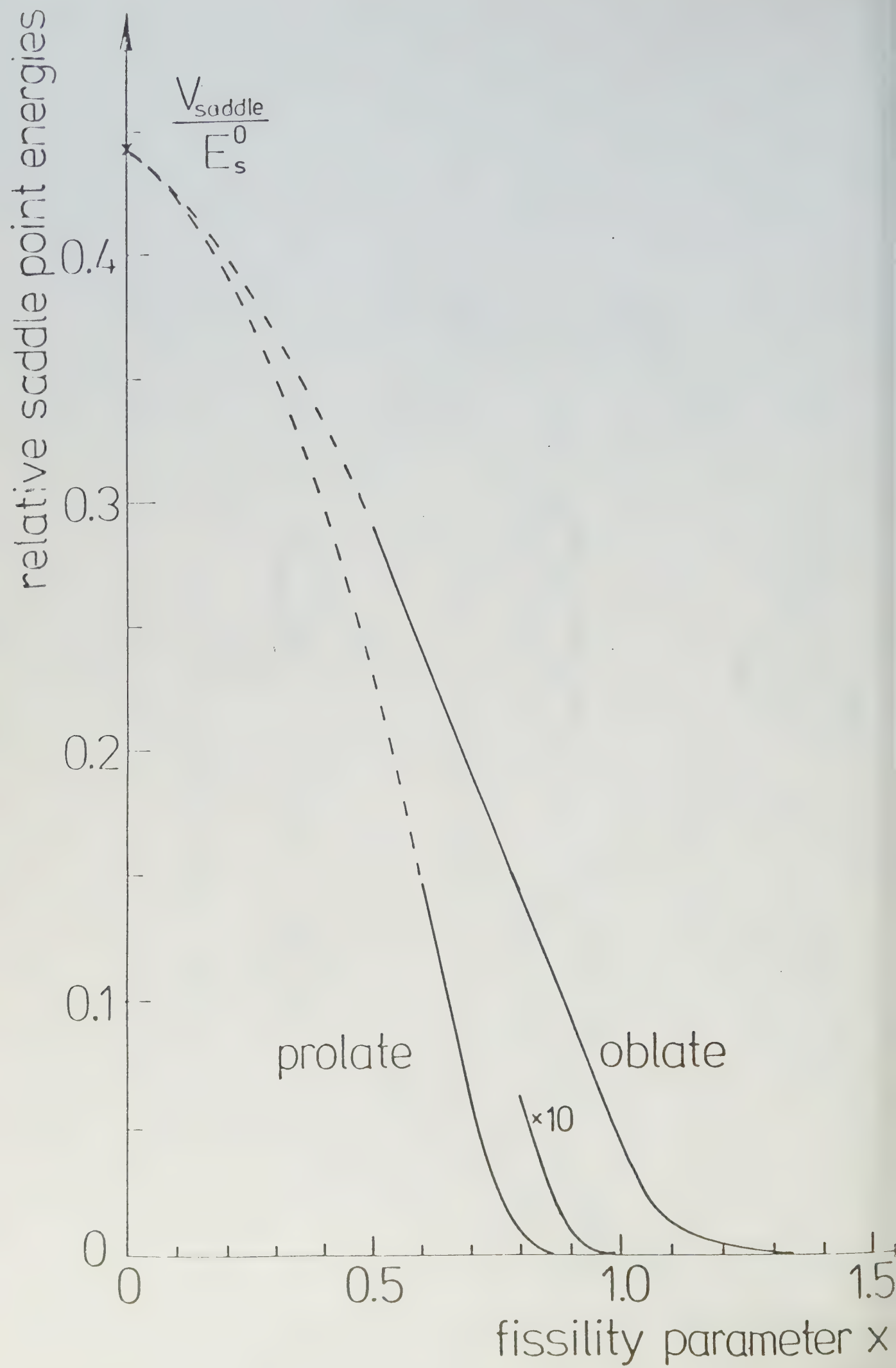


Abb.5



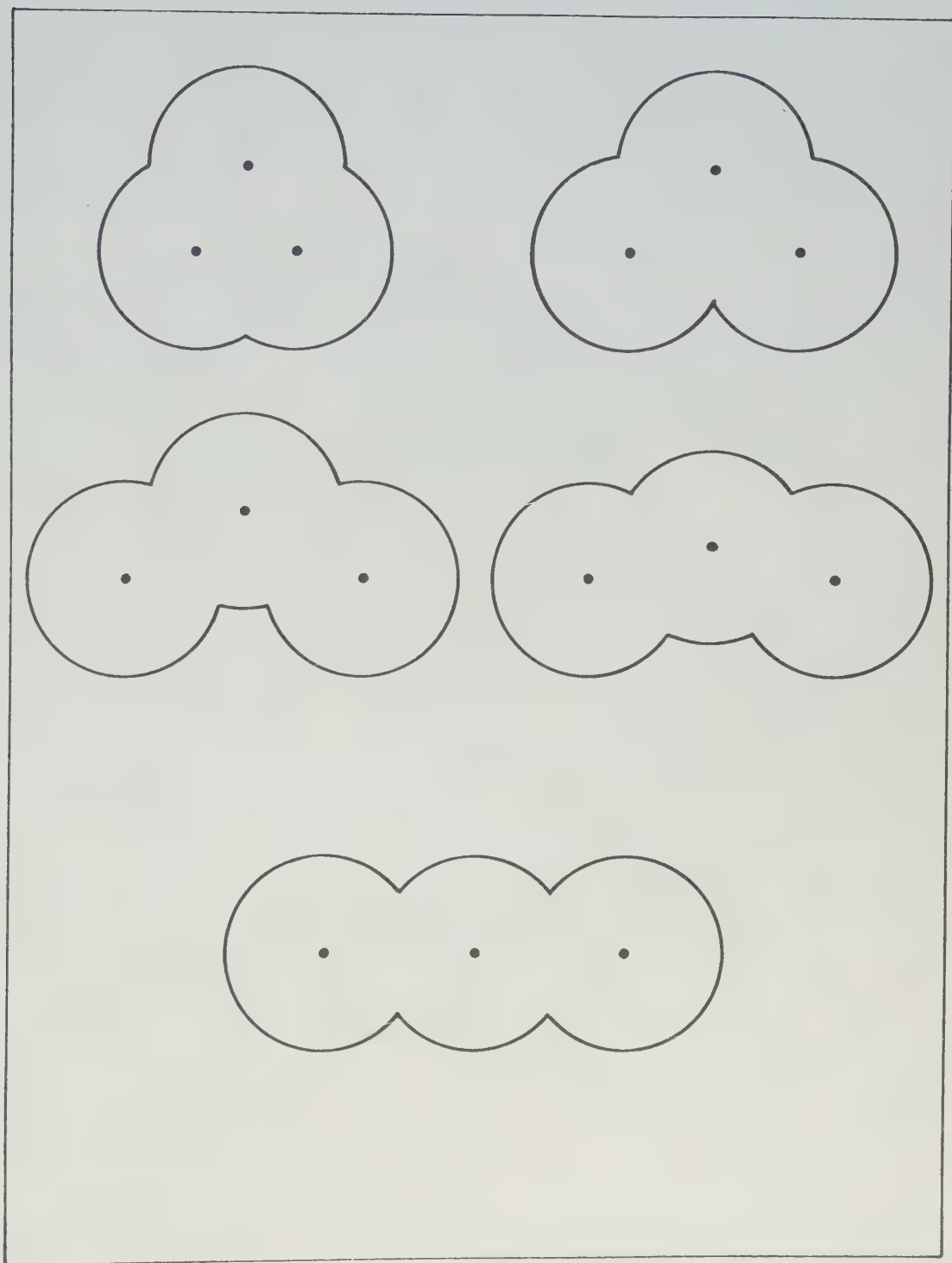


Abb.7

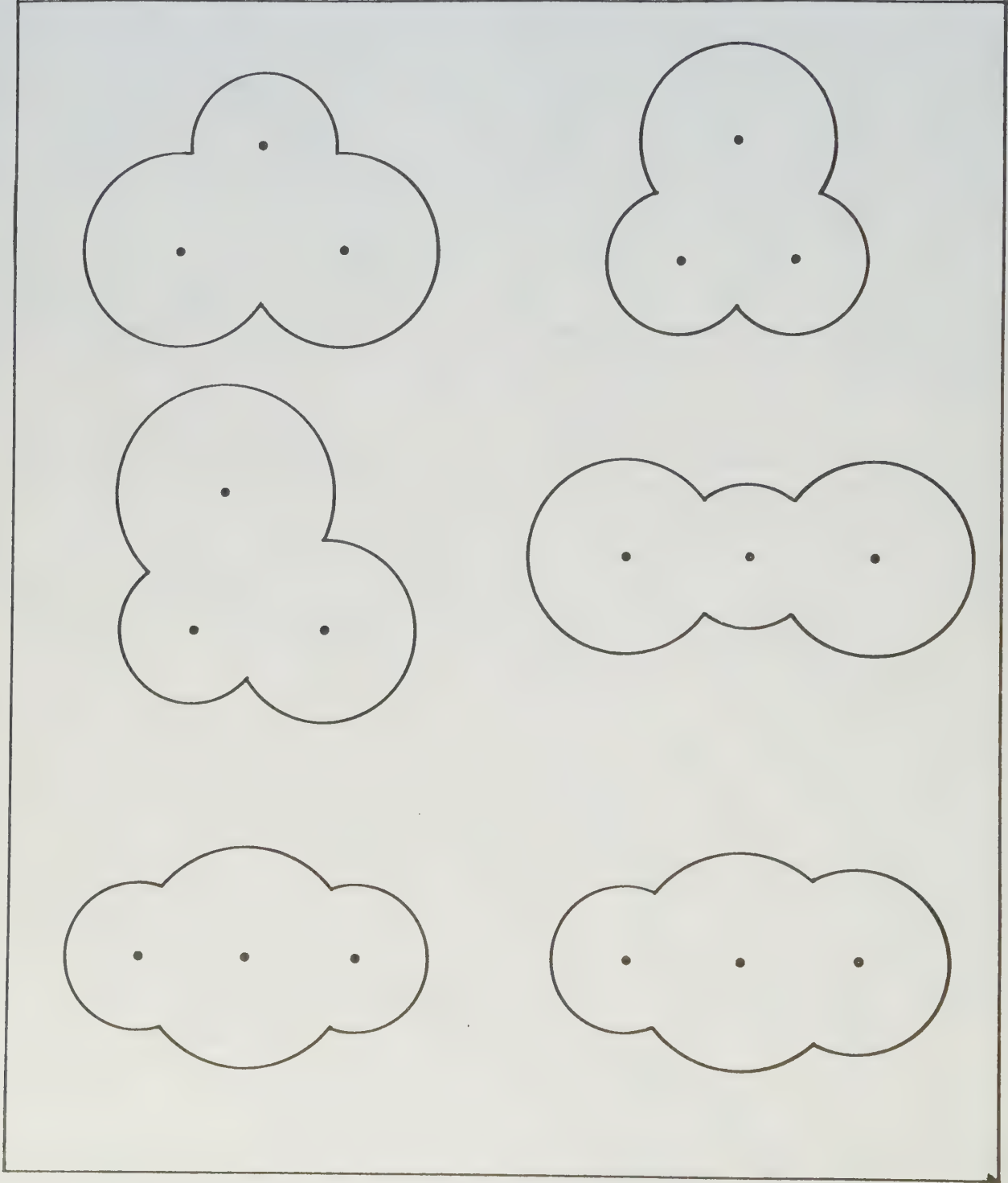


Abb.8

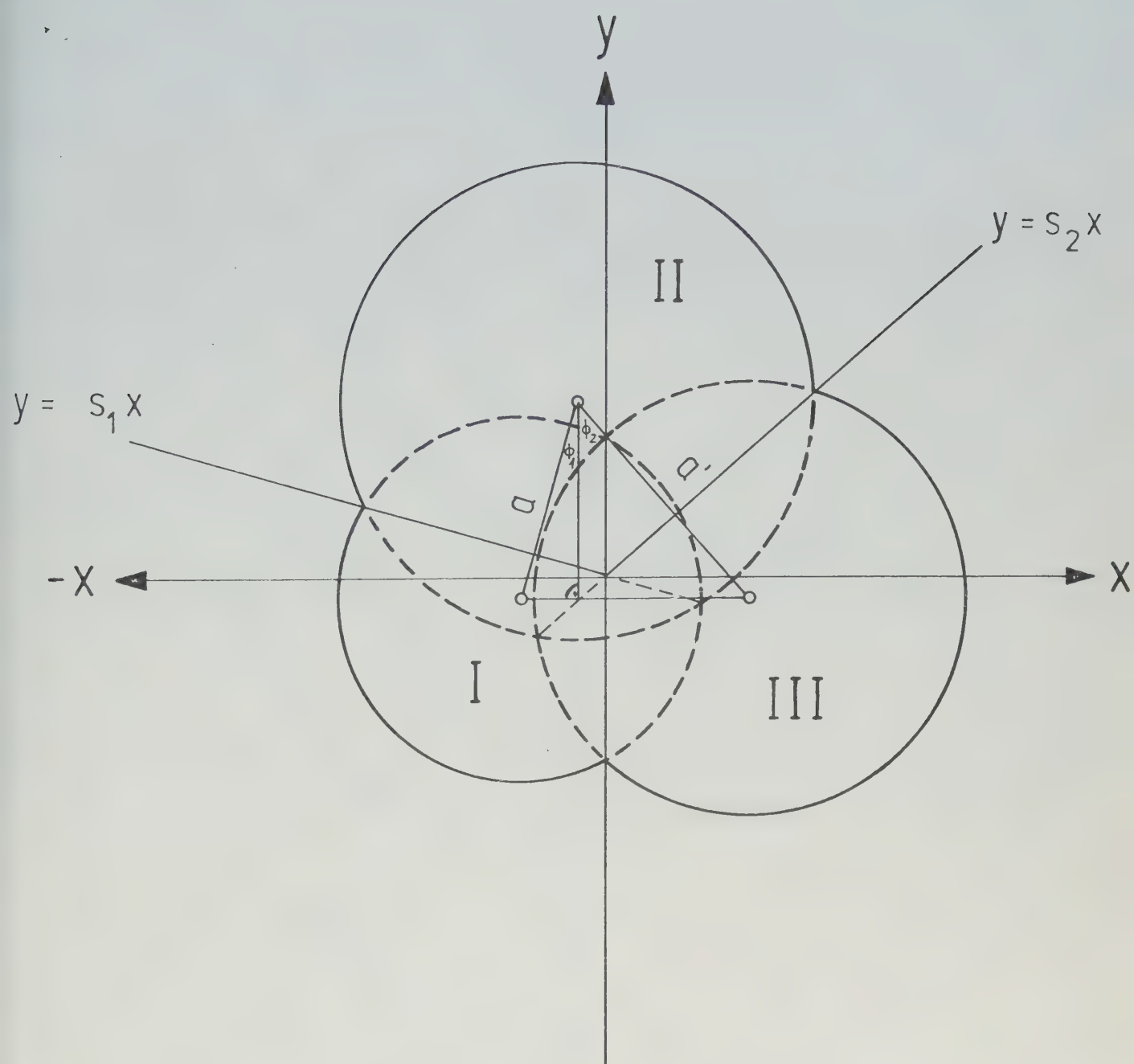


Abb.9

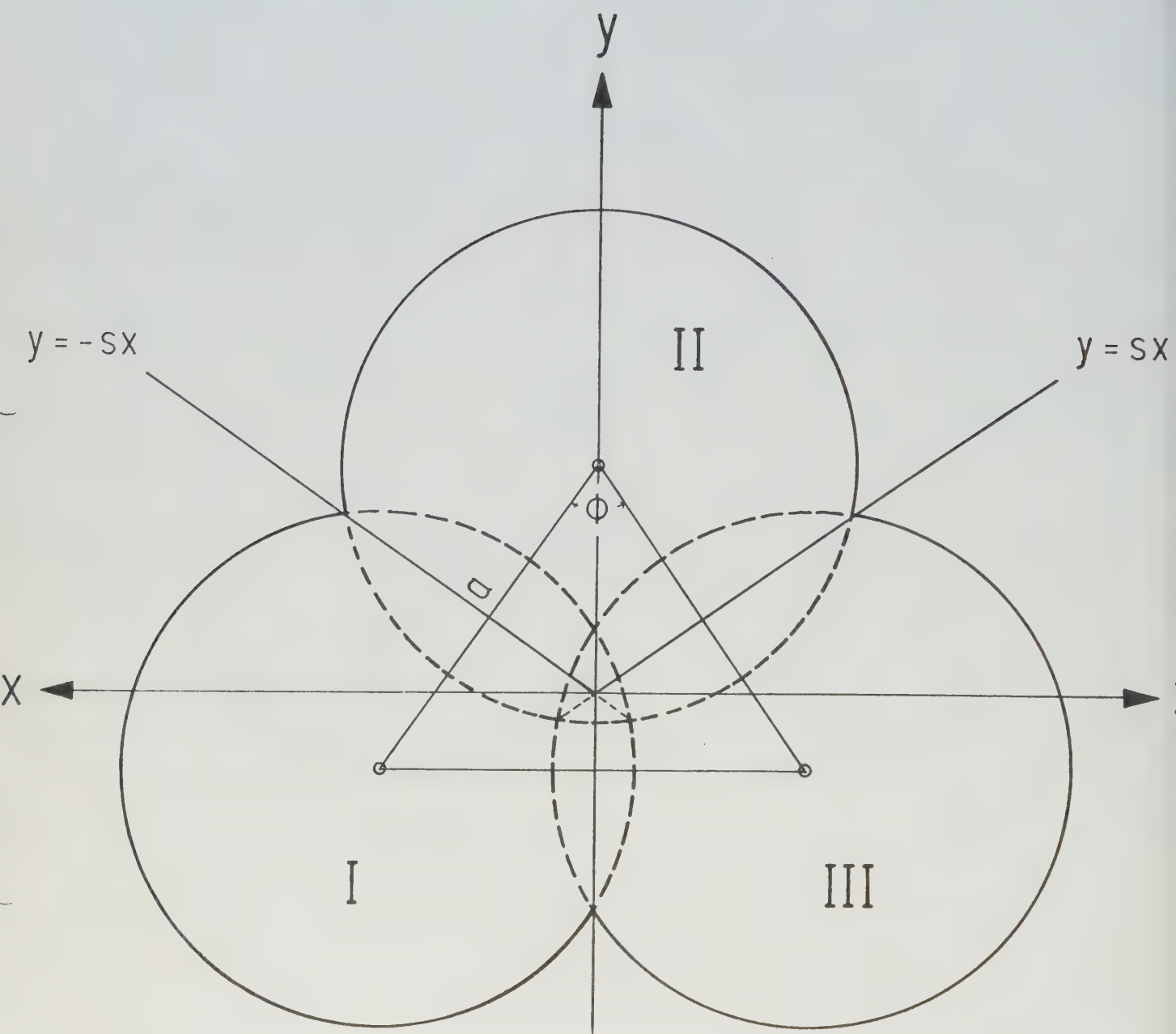


Abb.10

$$\lambda = (n_x + n_y + 1)$$

↑

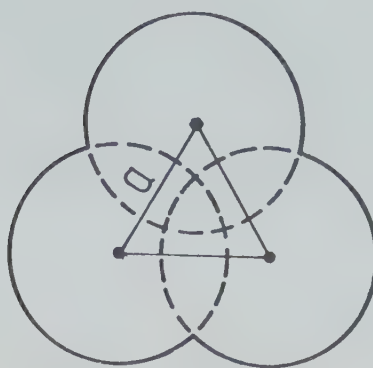
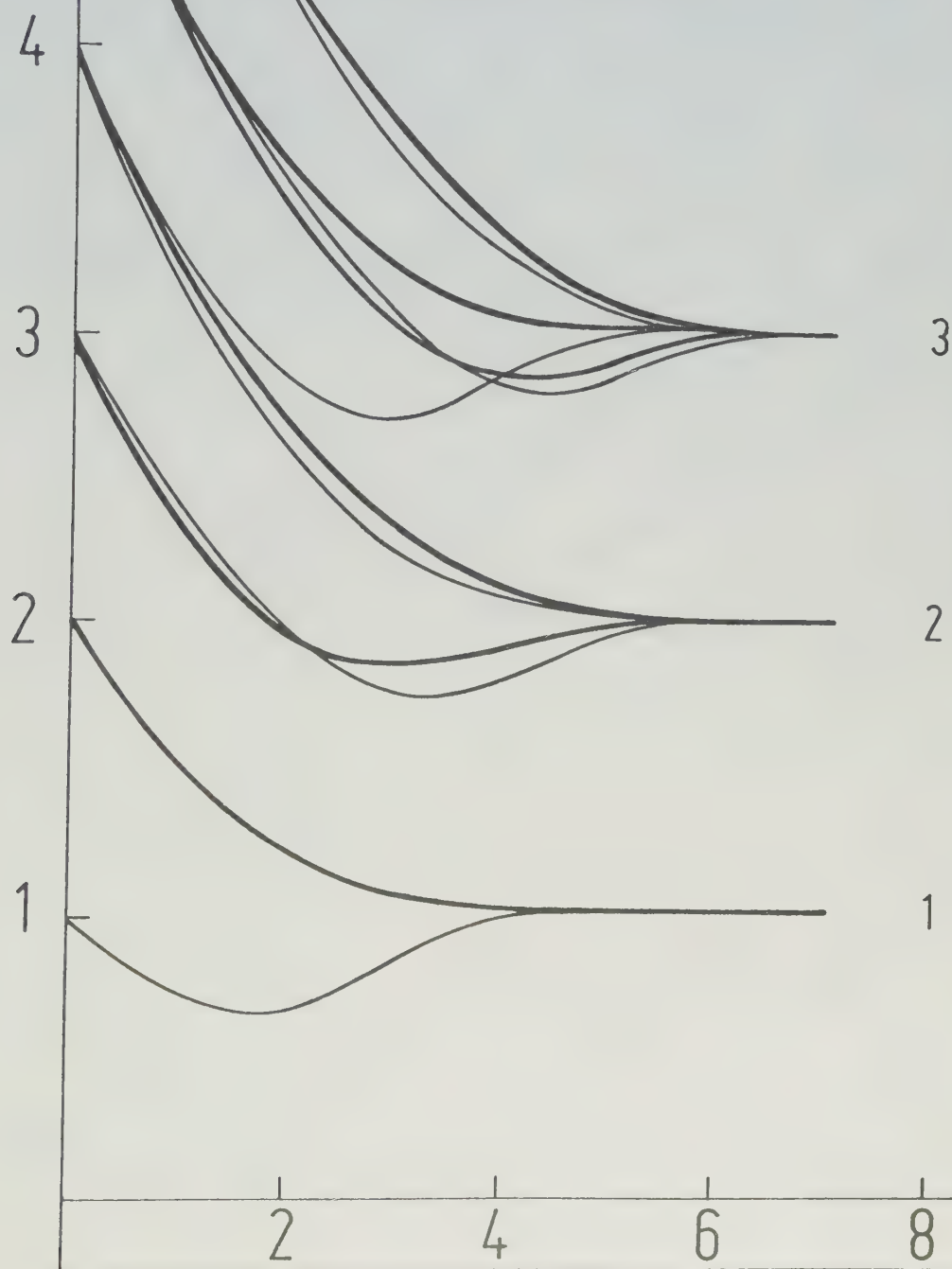
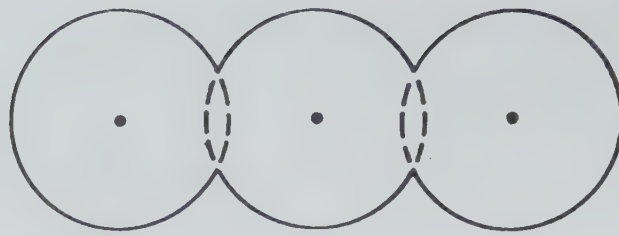


Abb.11



$$\lambda = (n_x + n_y + 1)$$

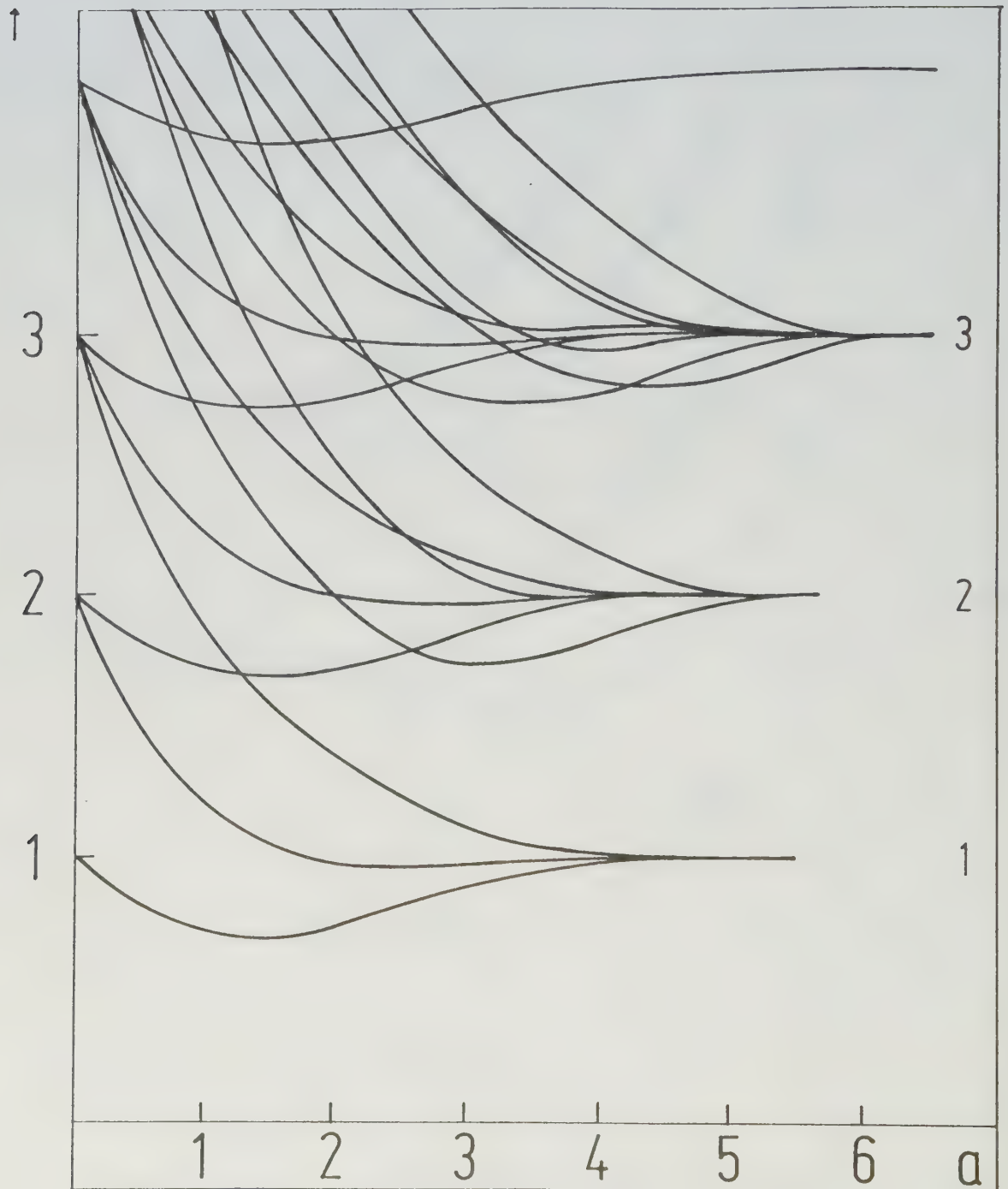


Abb.12

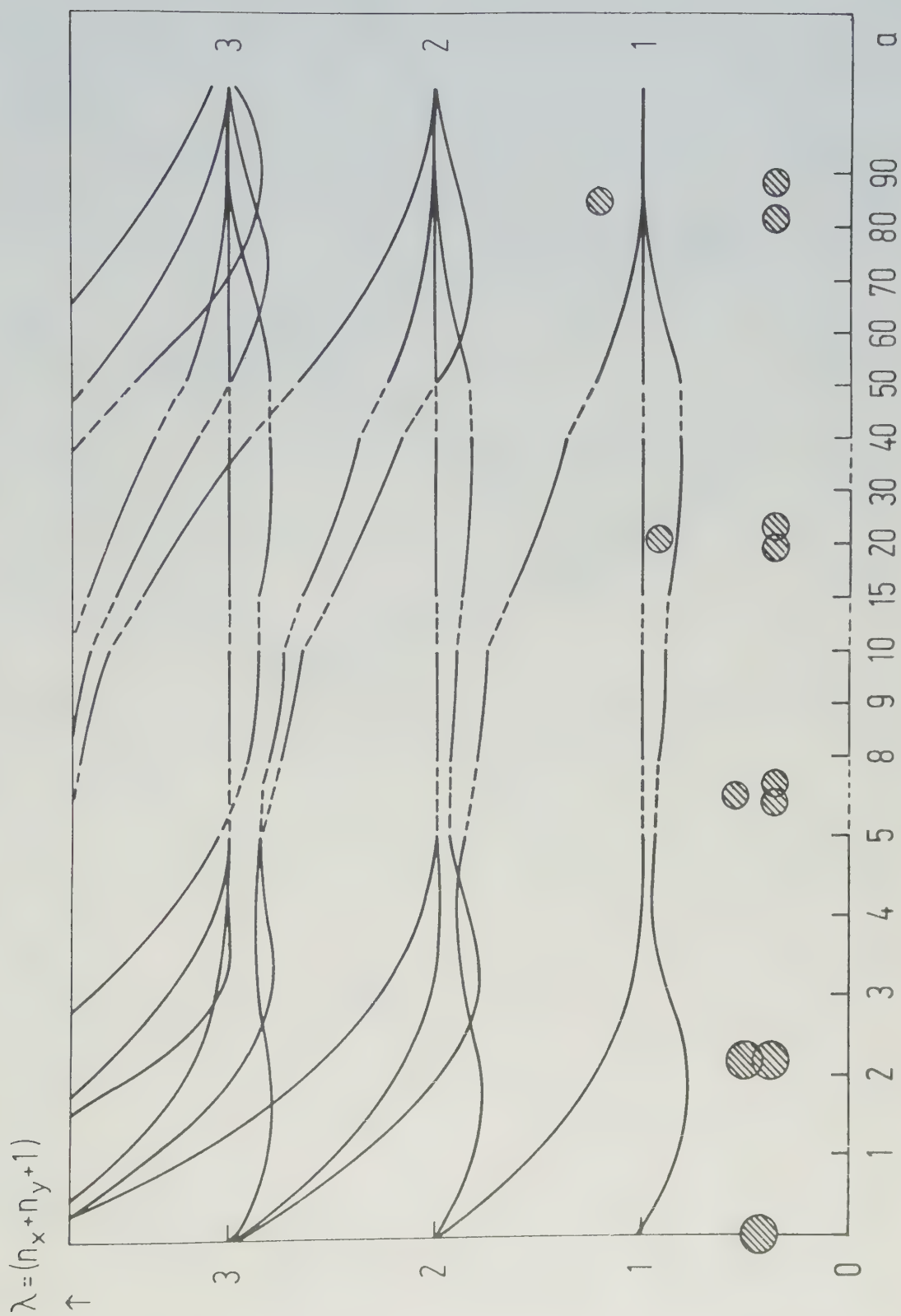


Abb.13

ENERGY
[MeV]

100

90

80

70

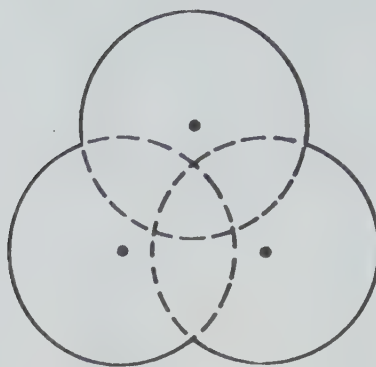
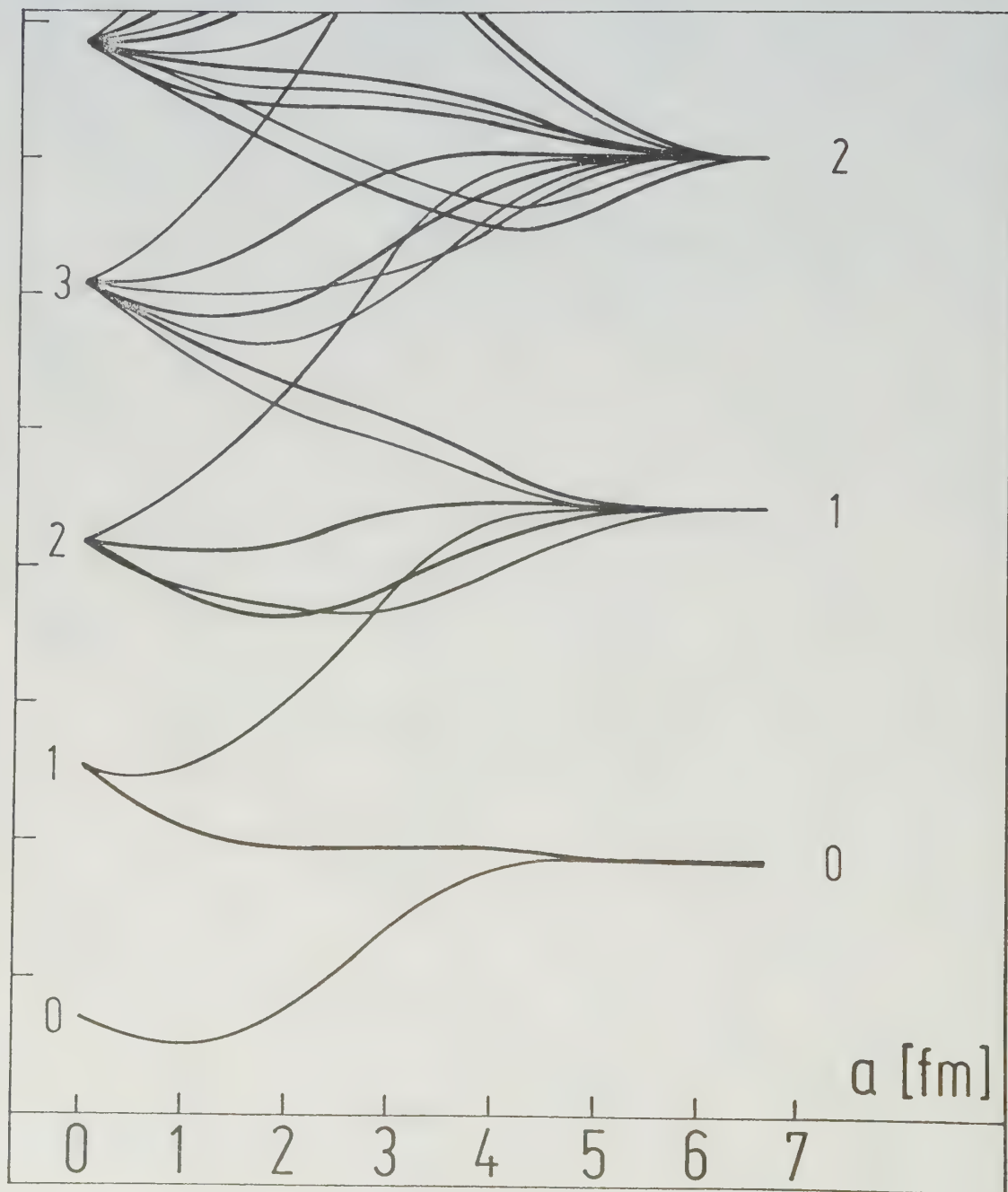
60

50

40

30

20



ENERGY
[MeV]

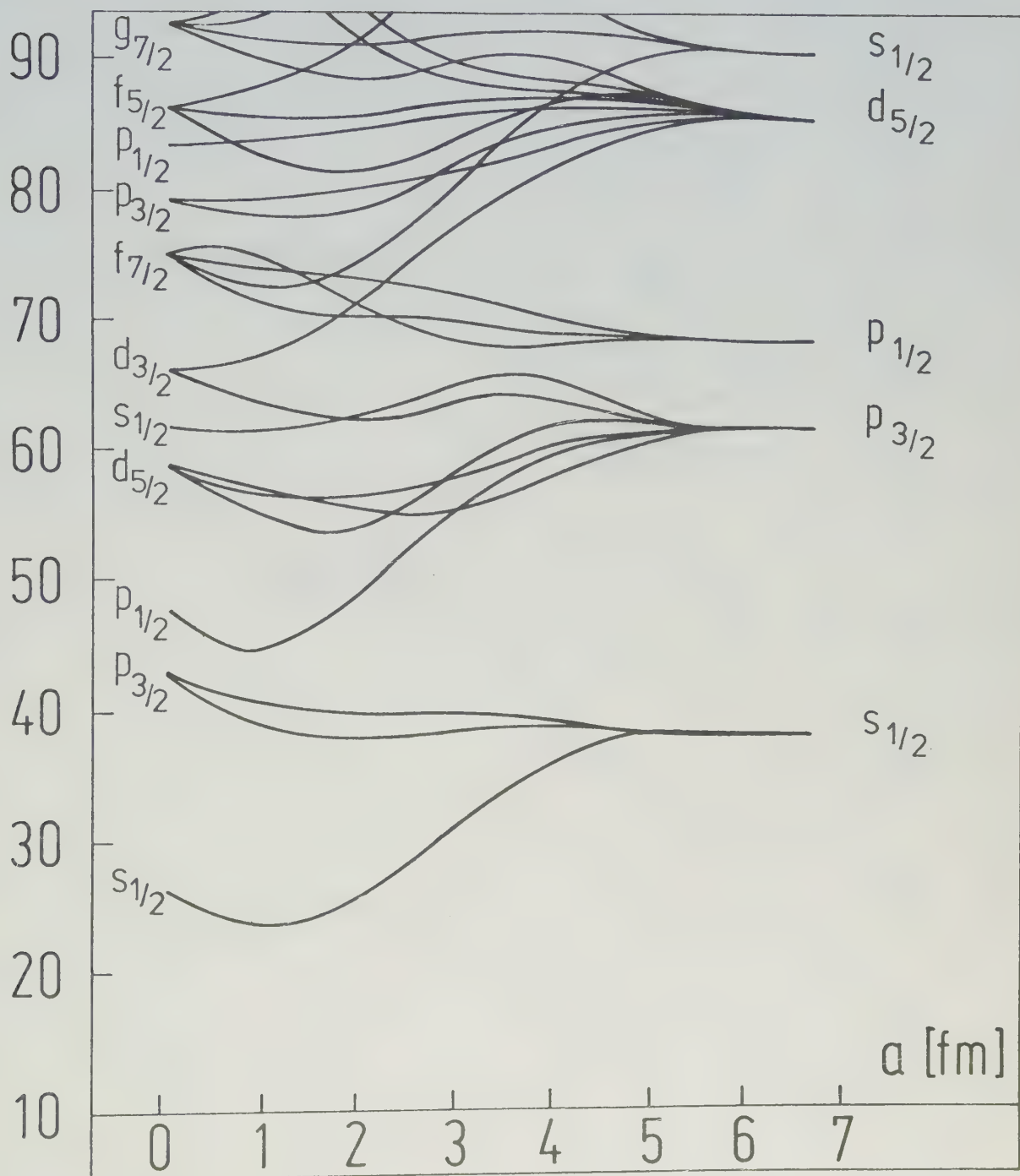
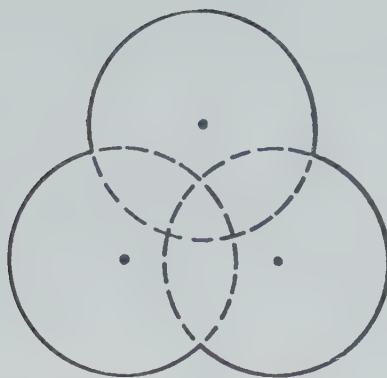


Abb.15

ENERGY
[MeV]

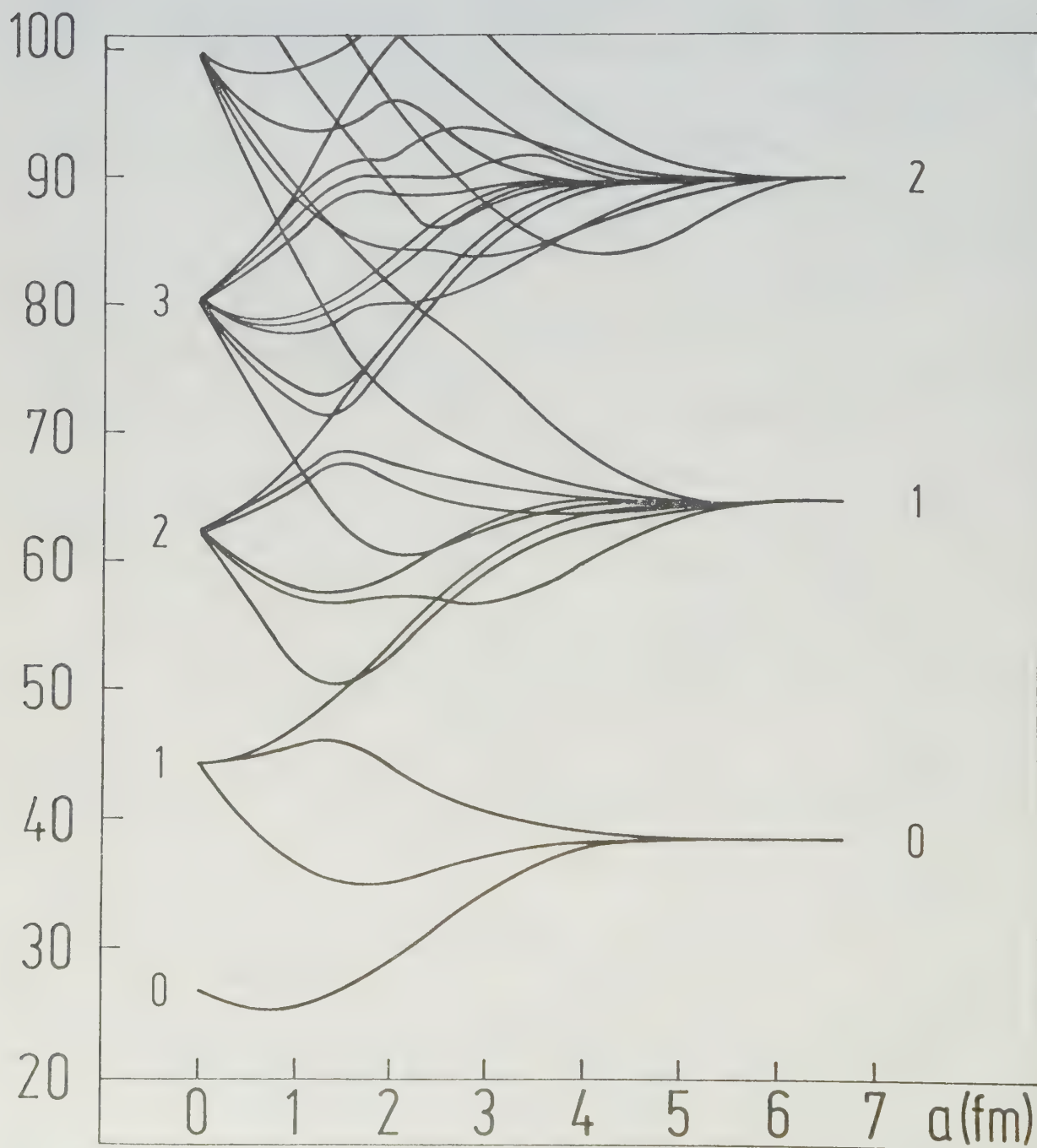
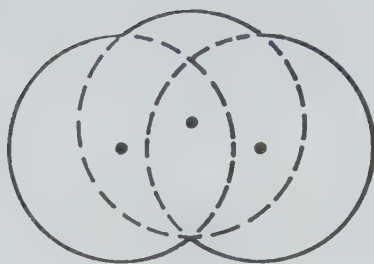


Abb. 16

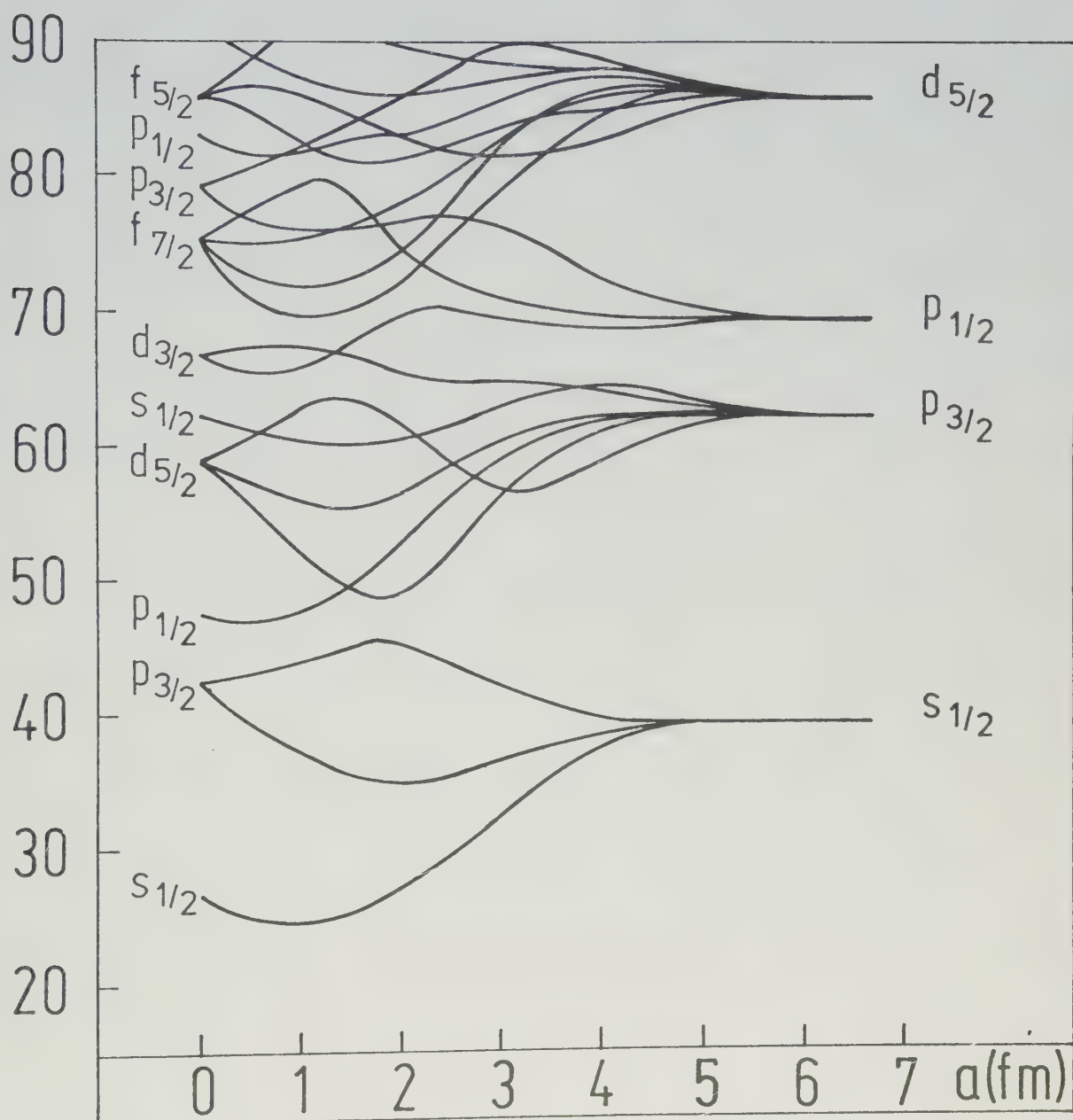
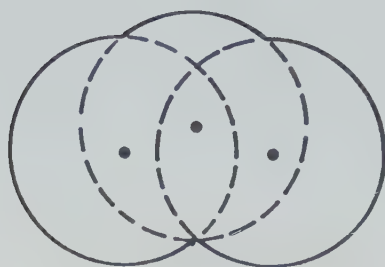


Abb.17

$$E = \sum_i \varepsilon_i \text{ [MeV]}$$

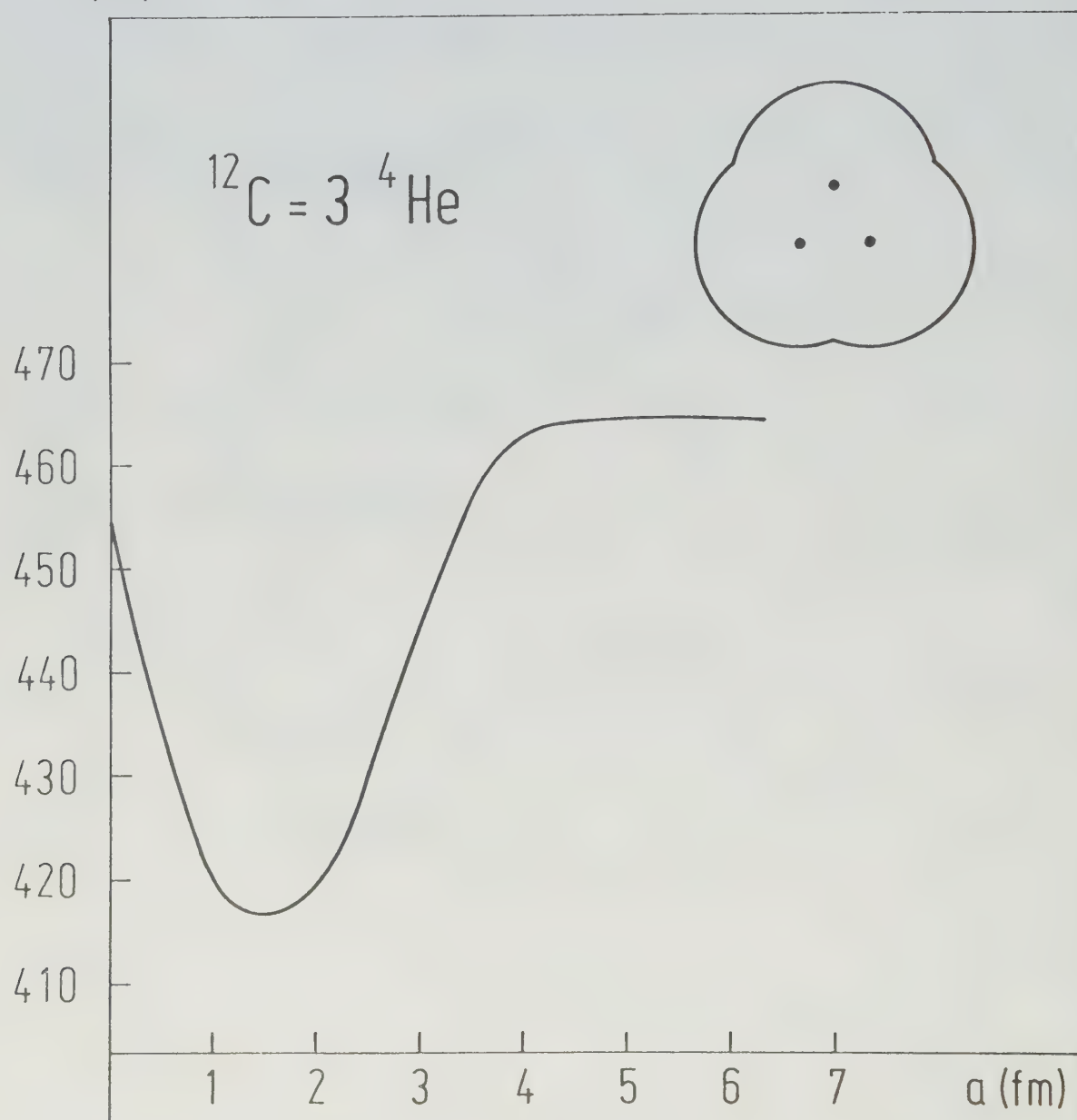


Abb.18

$$E = \sum_i \varepsilon_i \text{ [MeV]}$$

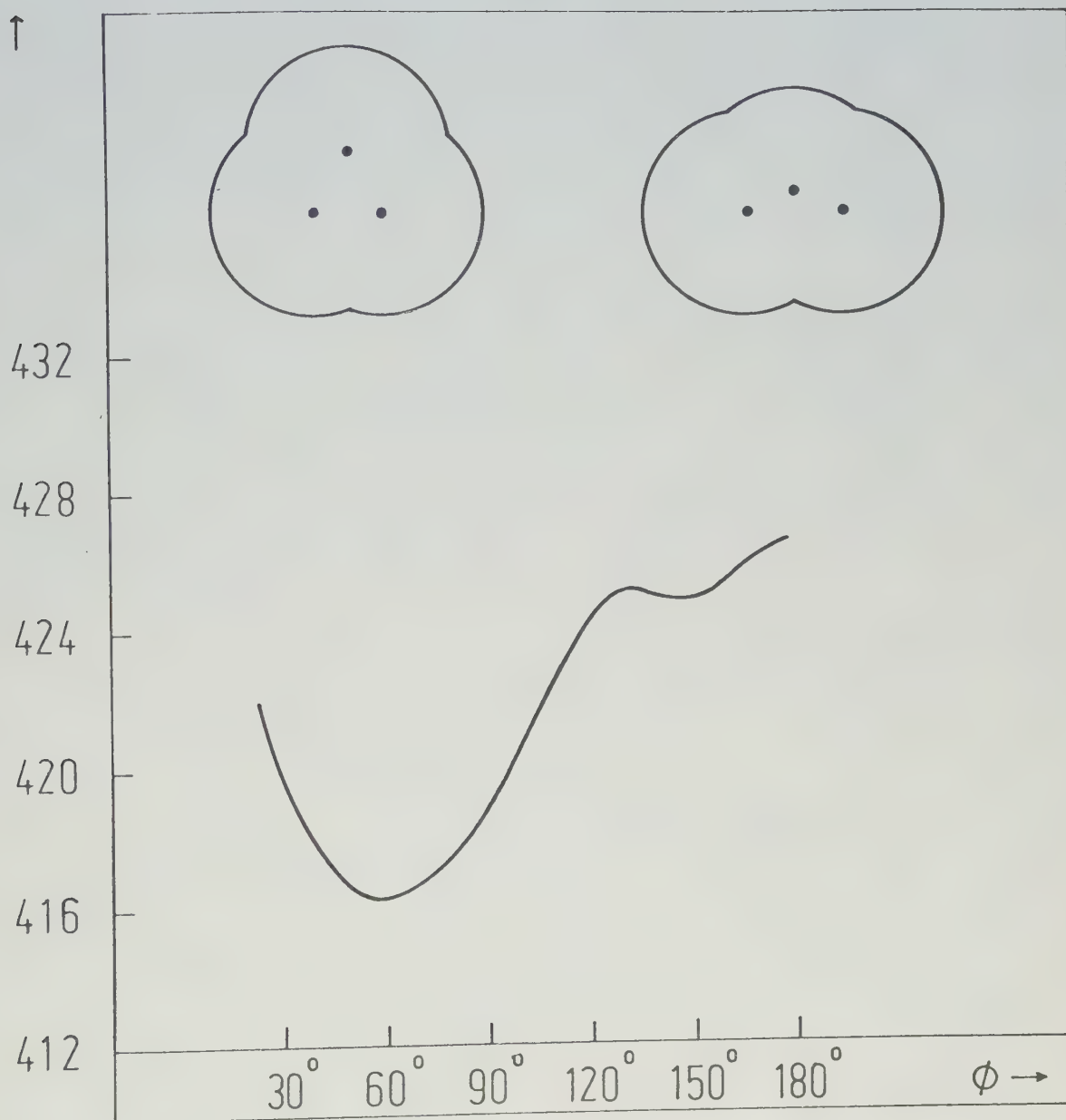


Abb.19

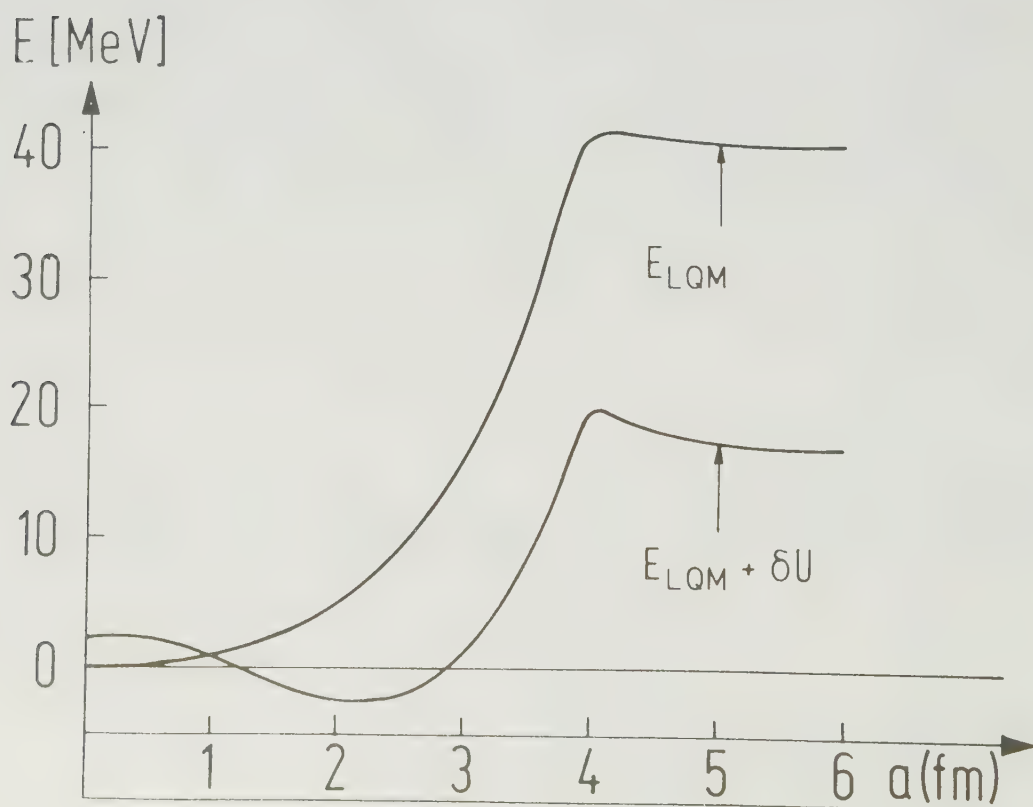
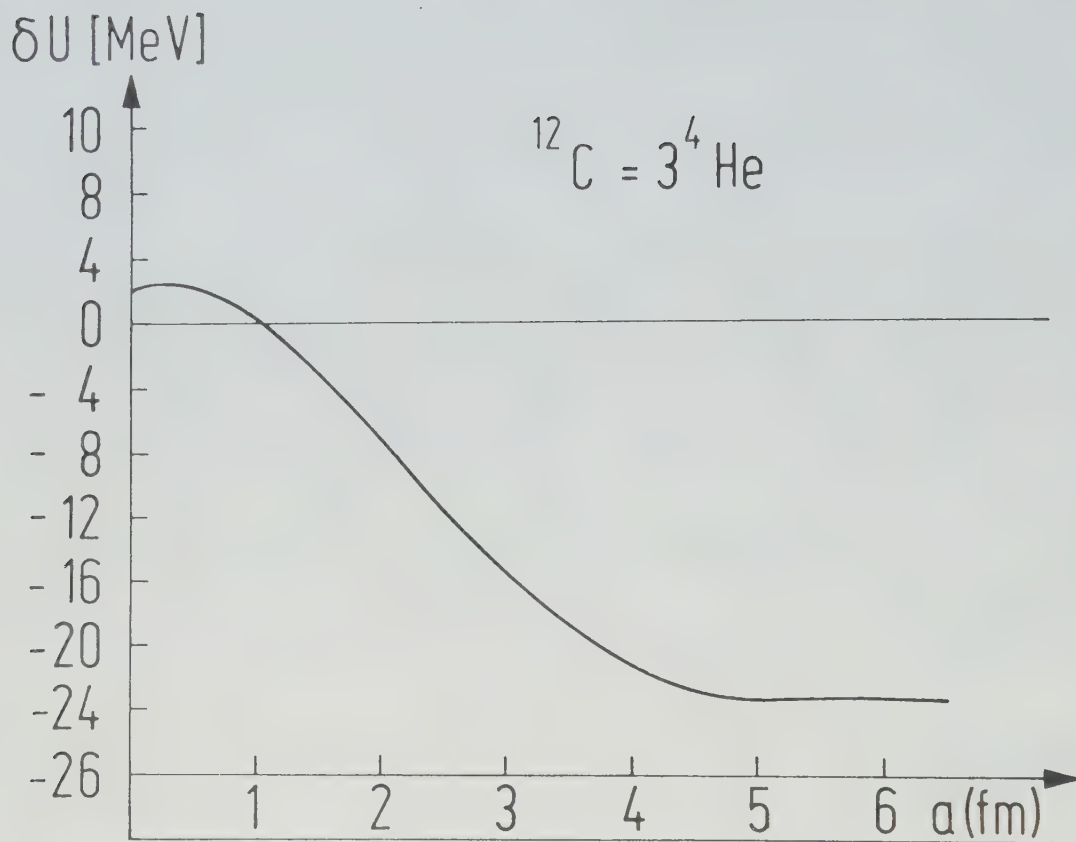


Abb.20

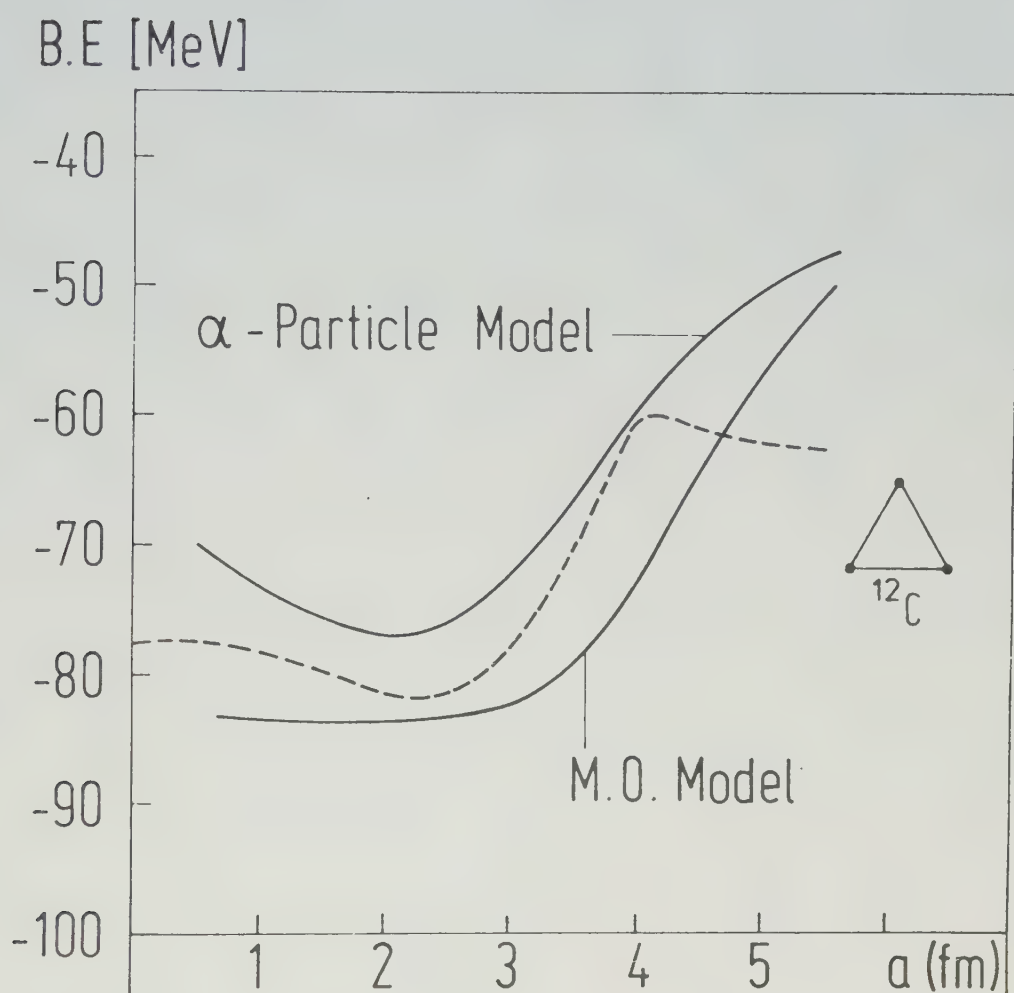


Abb.21

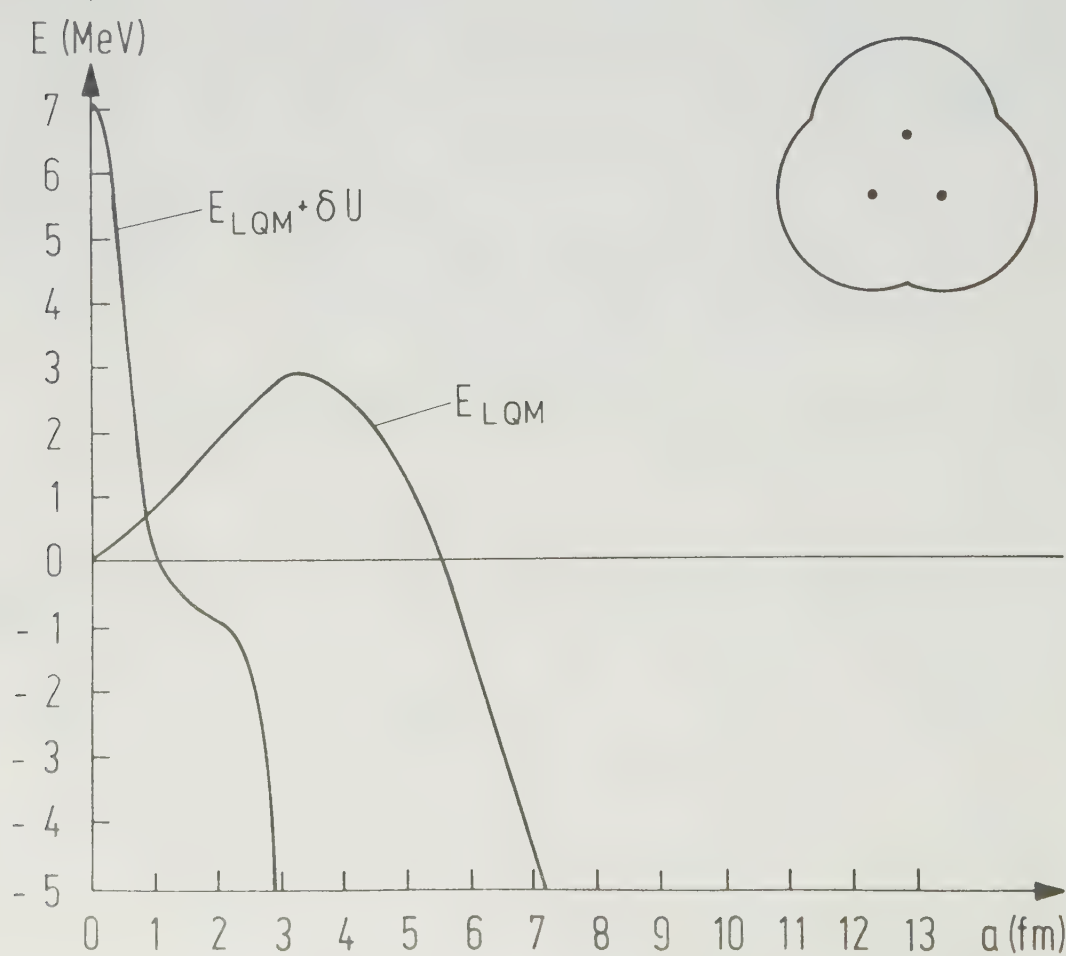
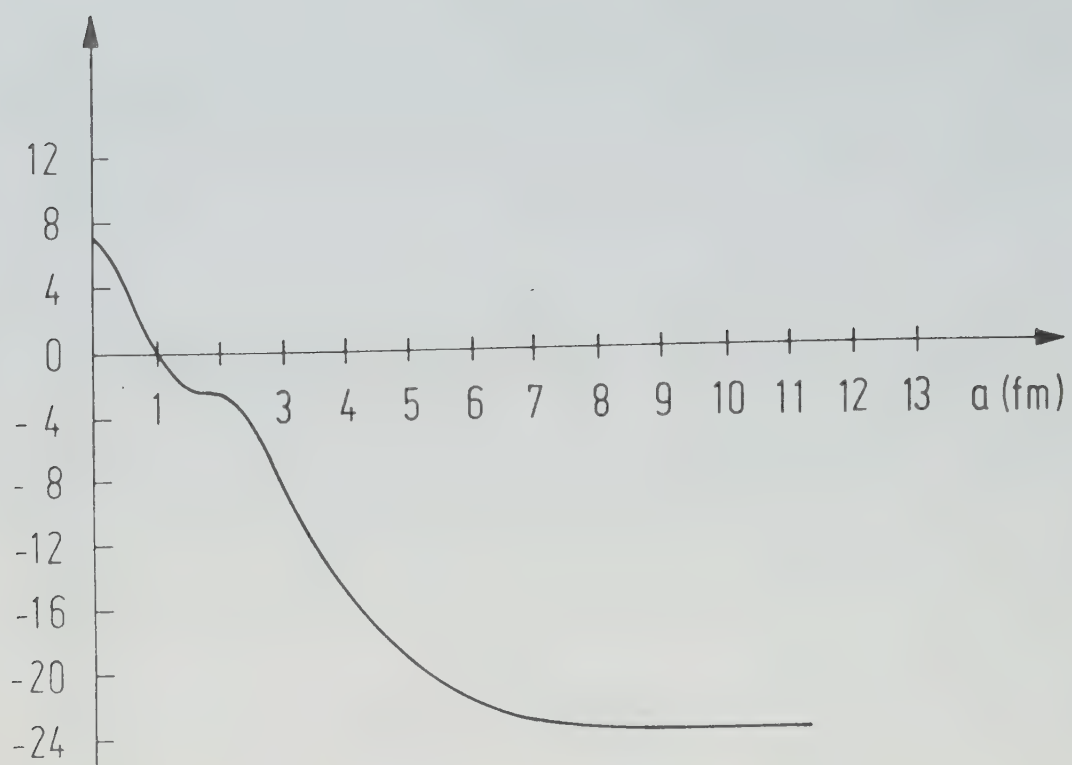


Abb.22

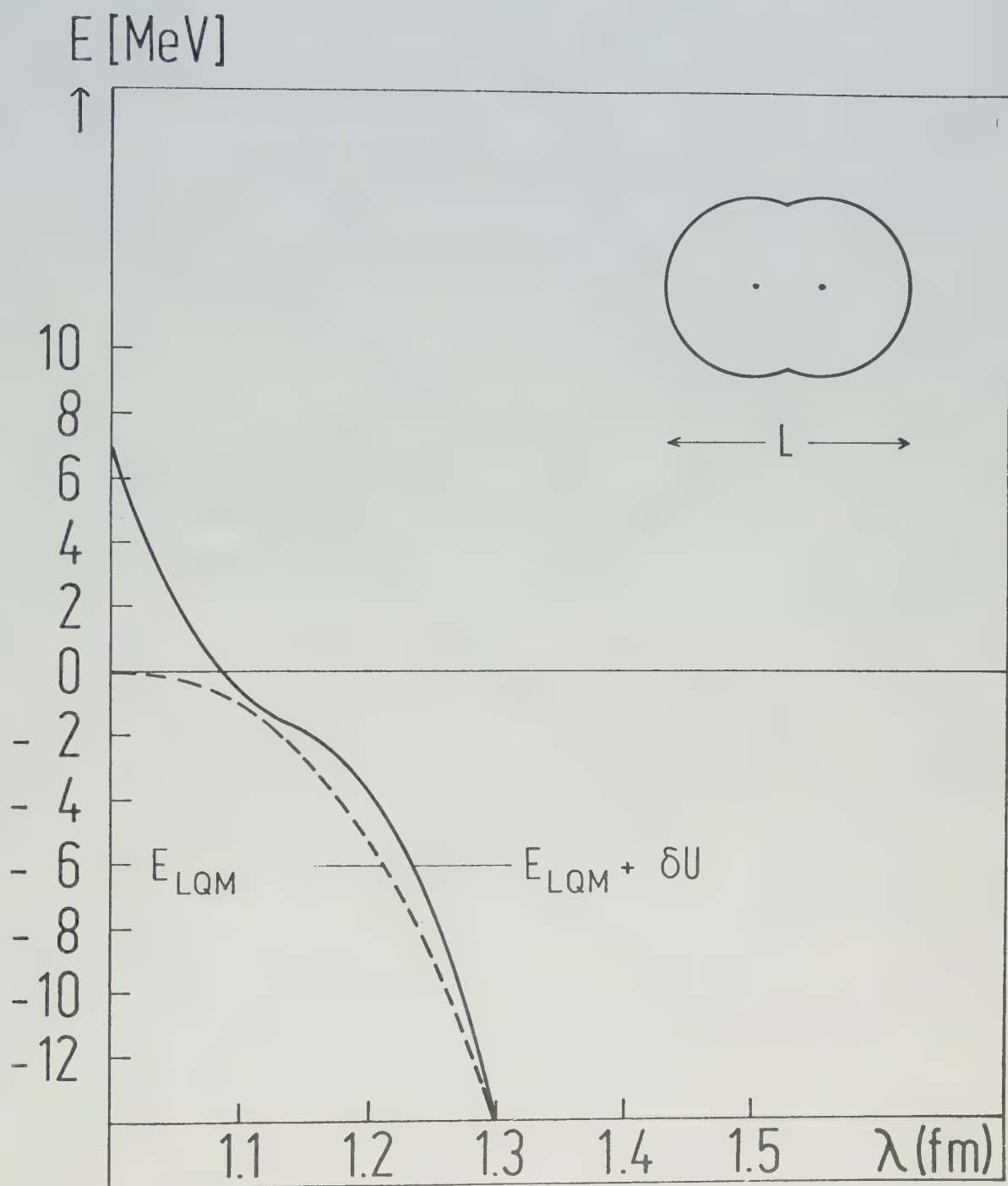


Abb.23

ENERGY
[MeV]

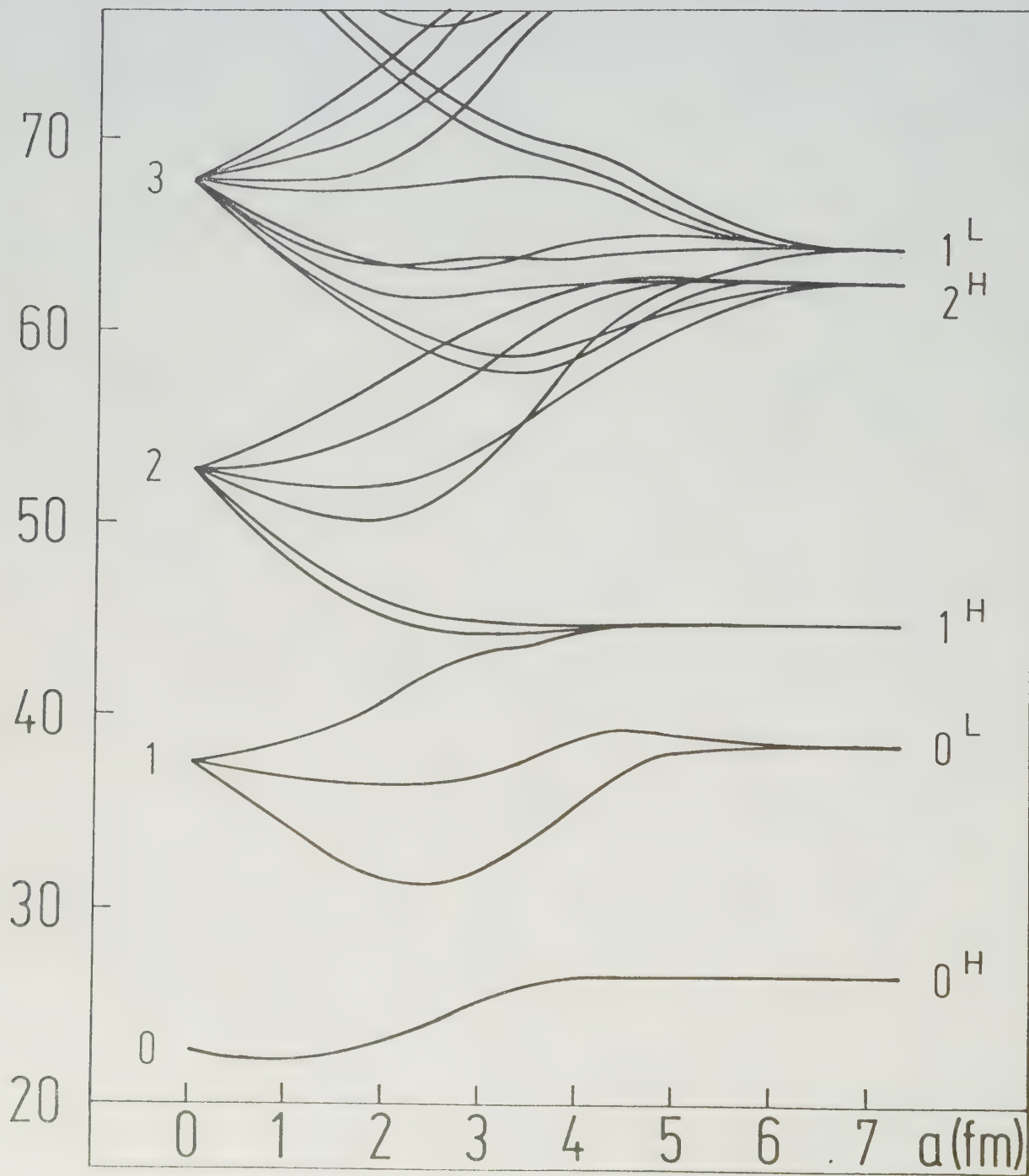
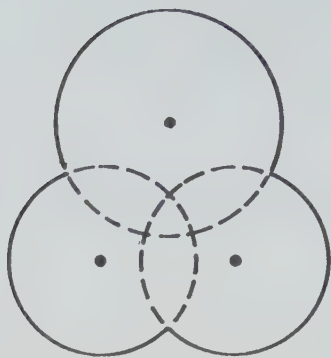


Abb. 24

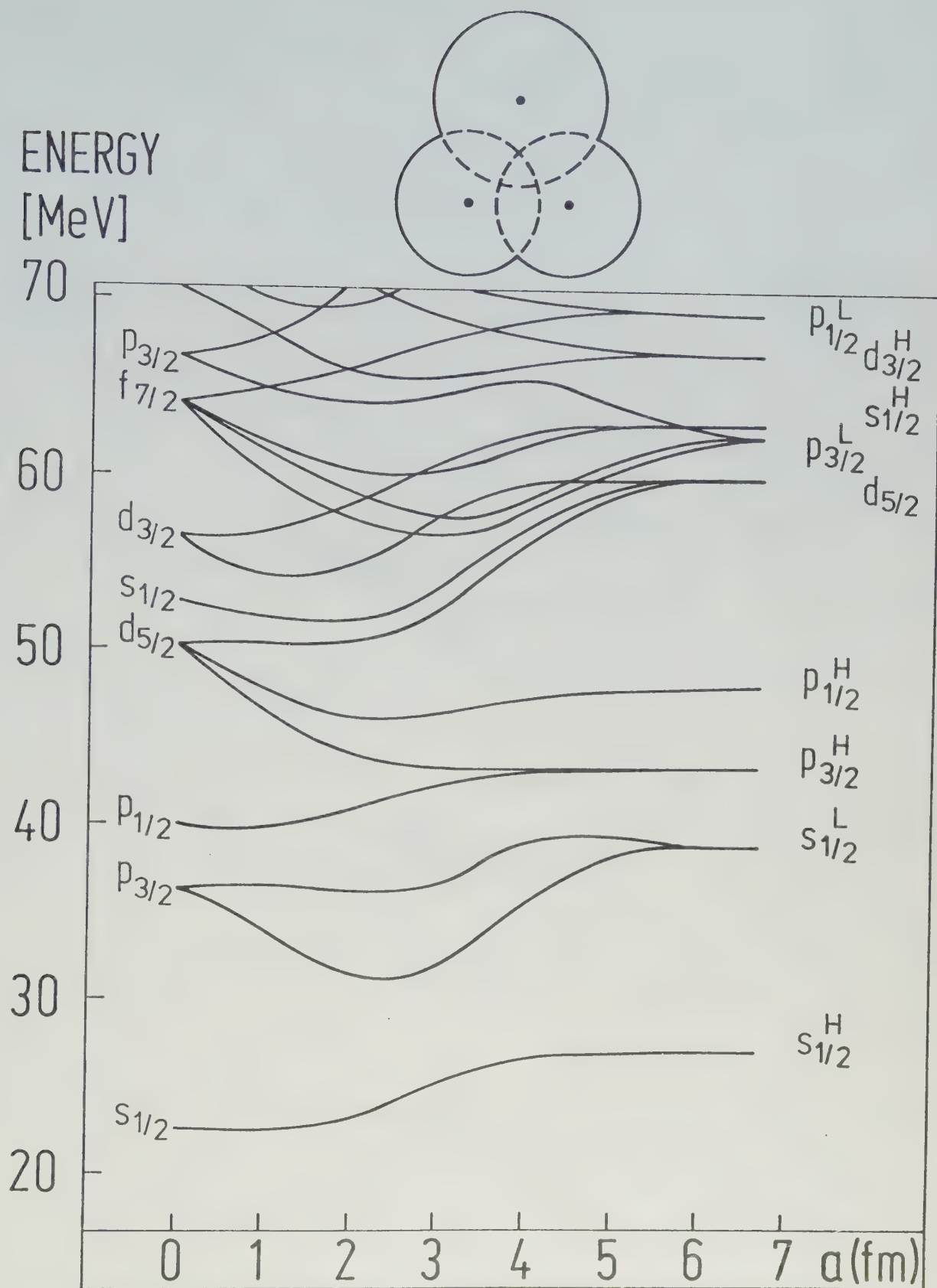


Abb. 25

ENERGY
[MeV]

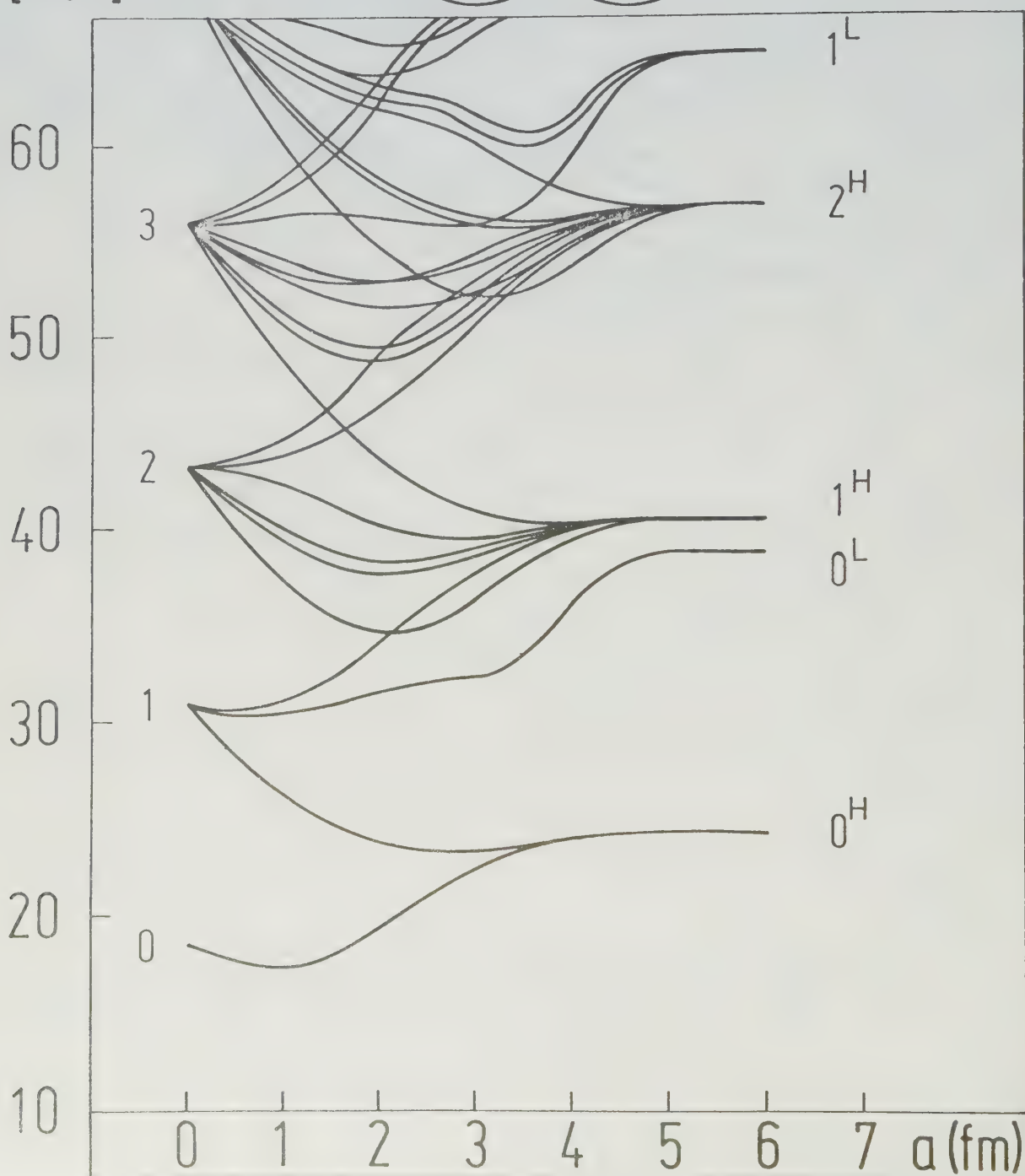
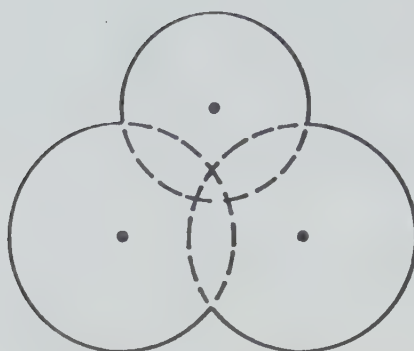


Abb.26

ENERGY
[MeV]

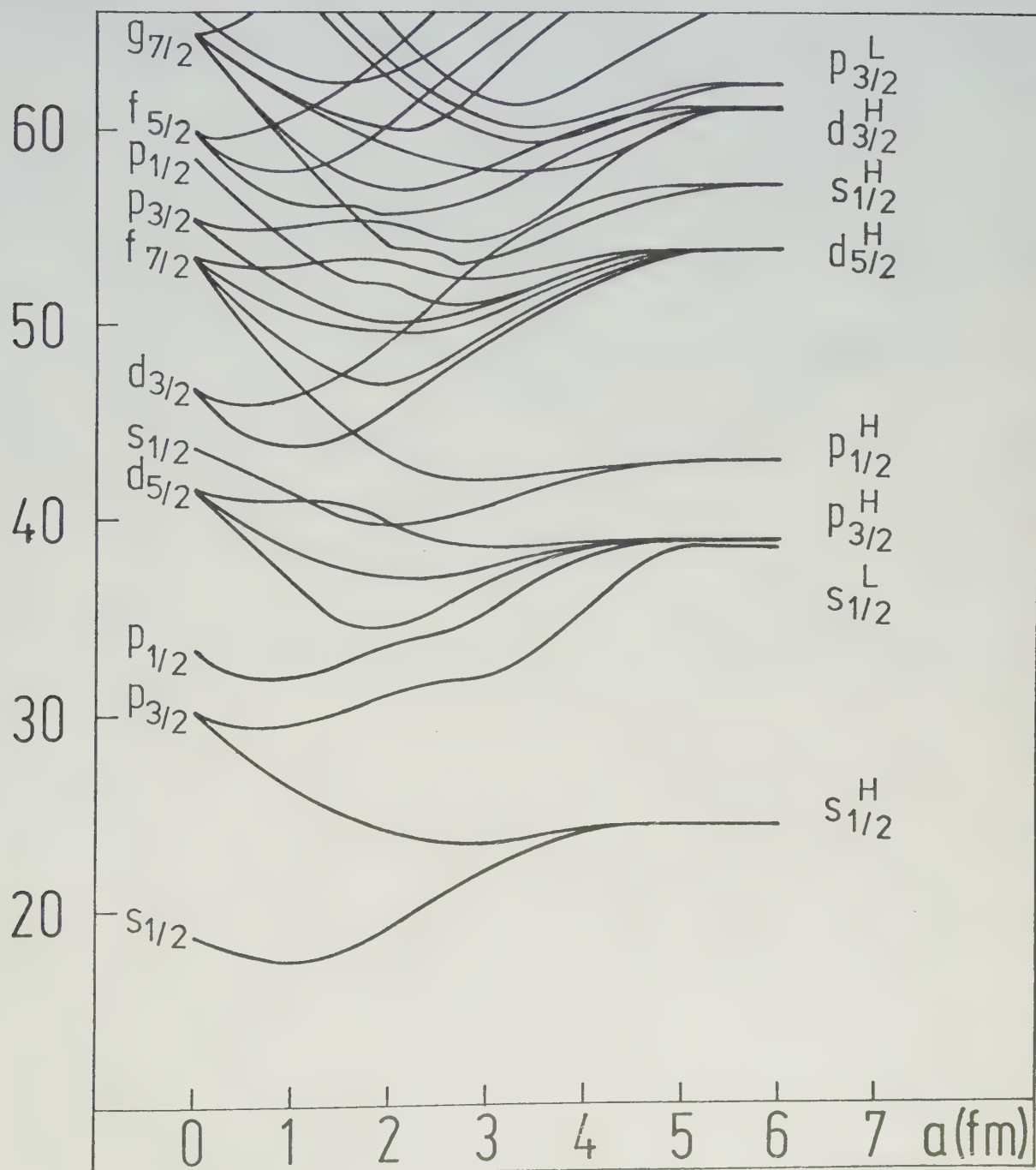
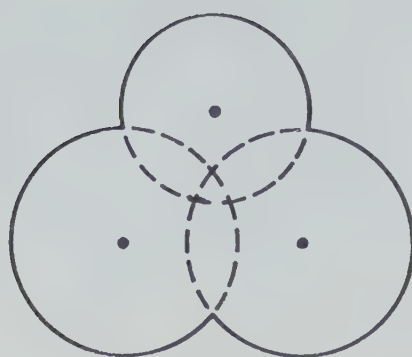
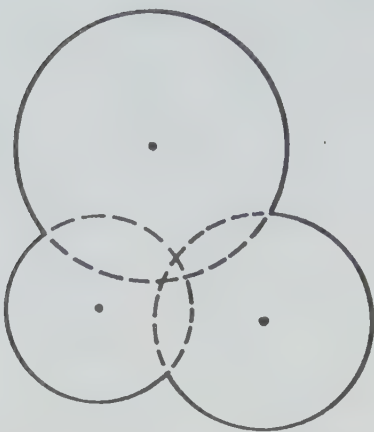
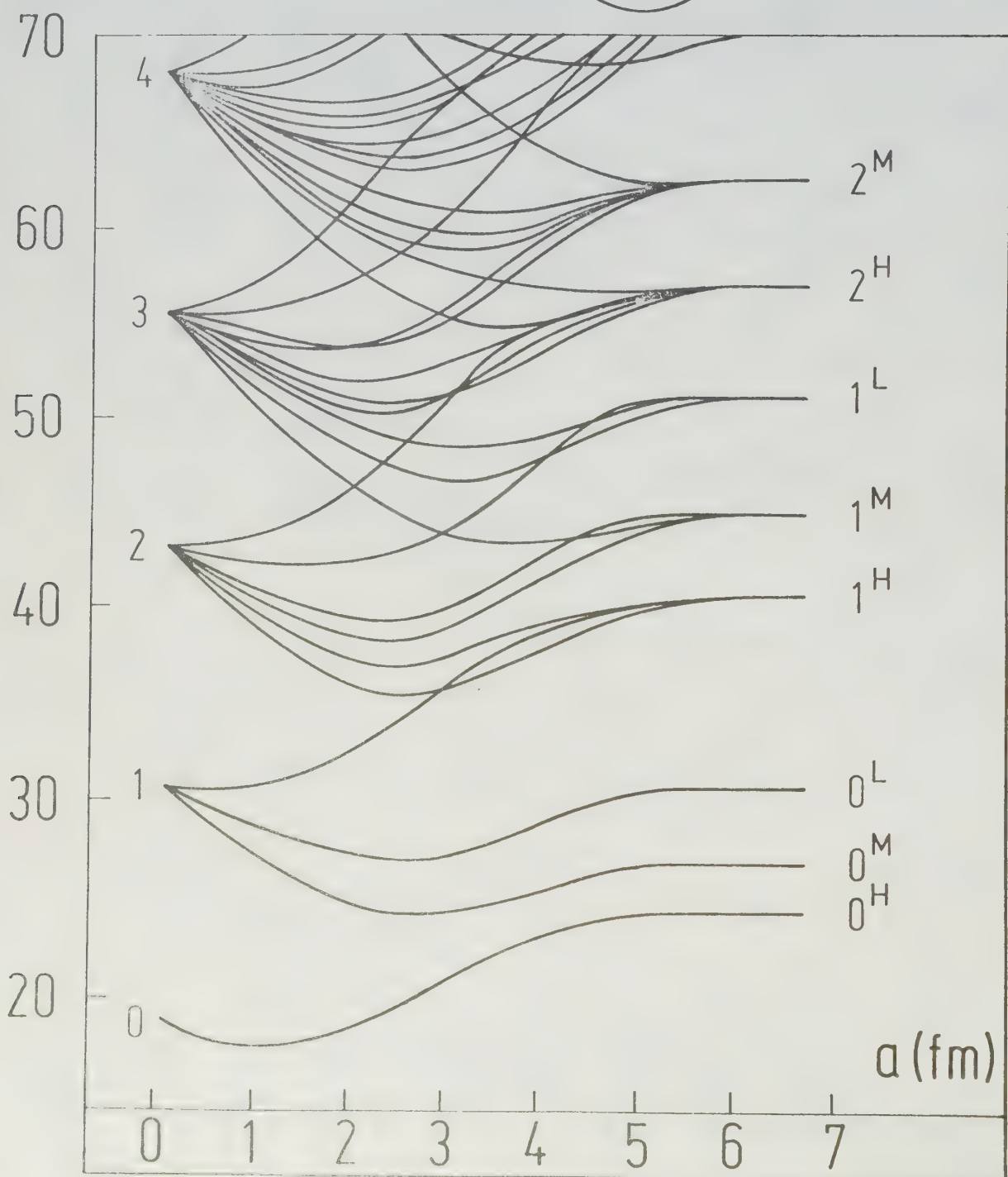


Abb. 27



ENERGY
[MeV]



ENERGY
[MeV]

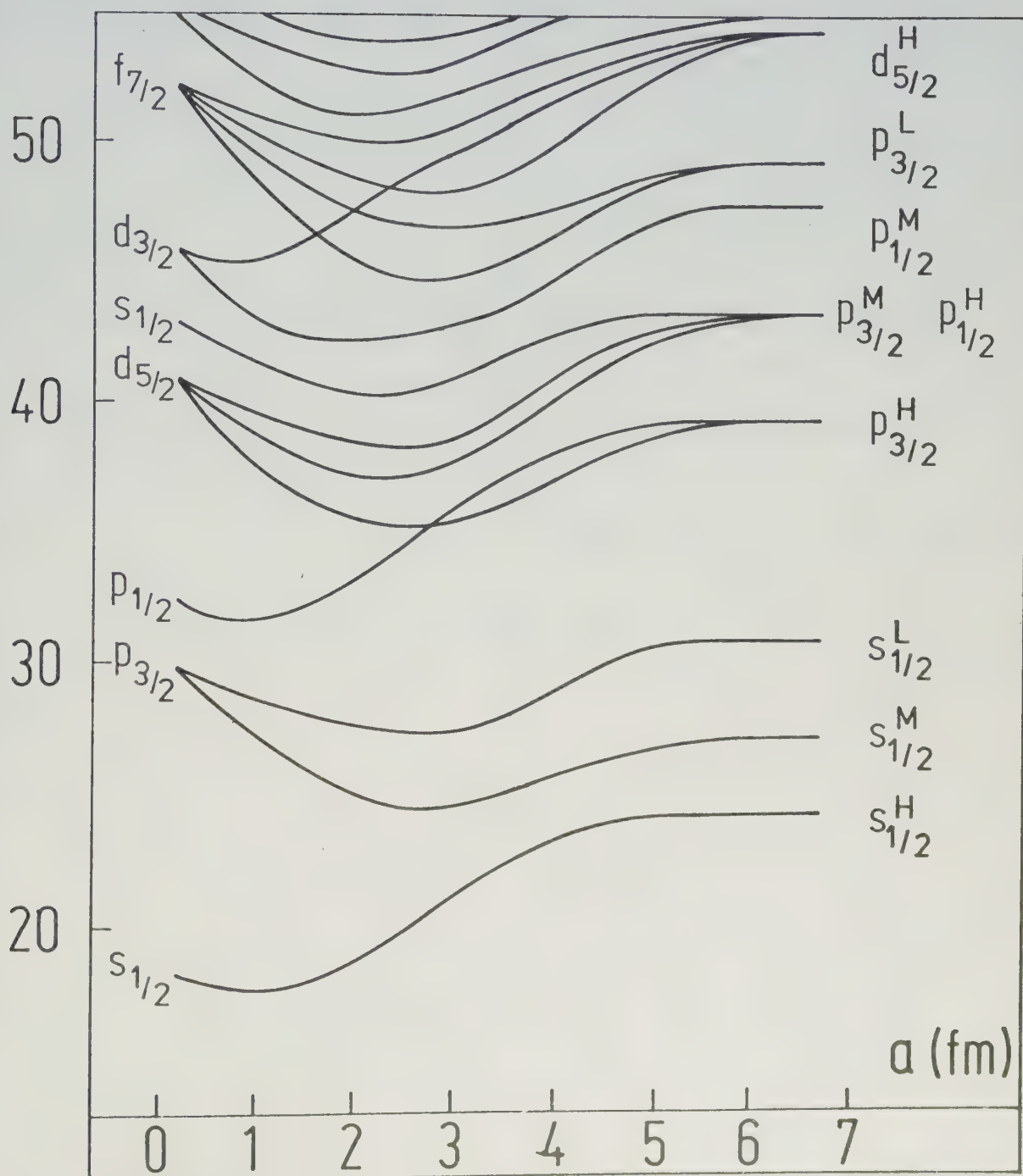
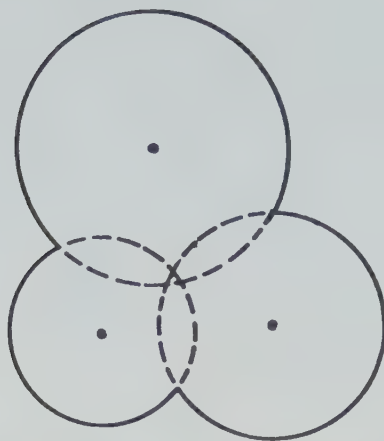


Abb. 29

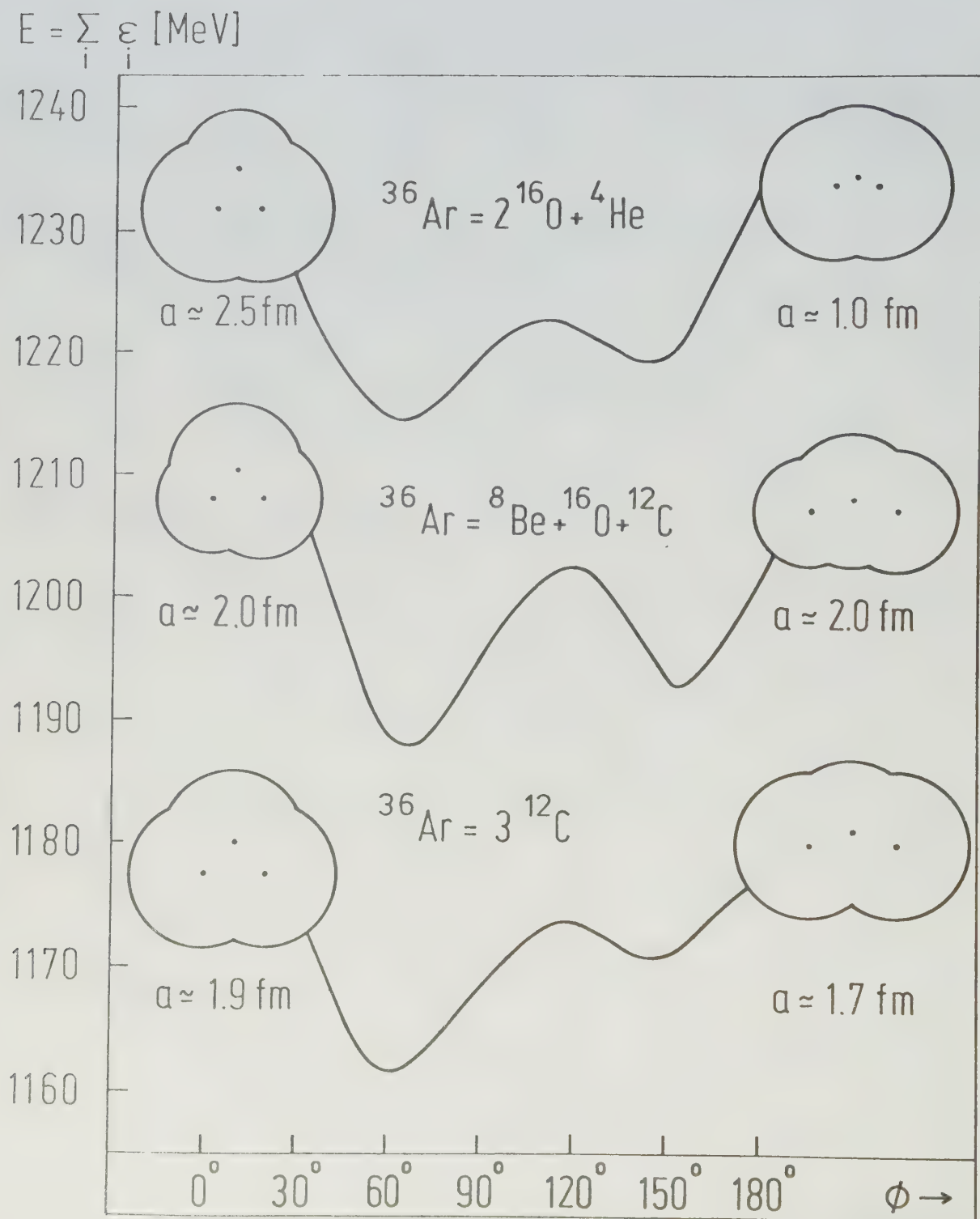


Abb.30

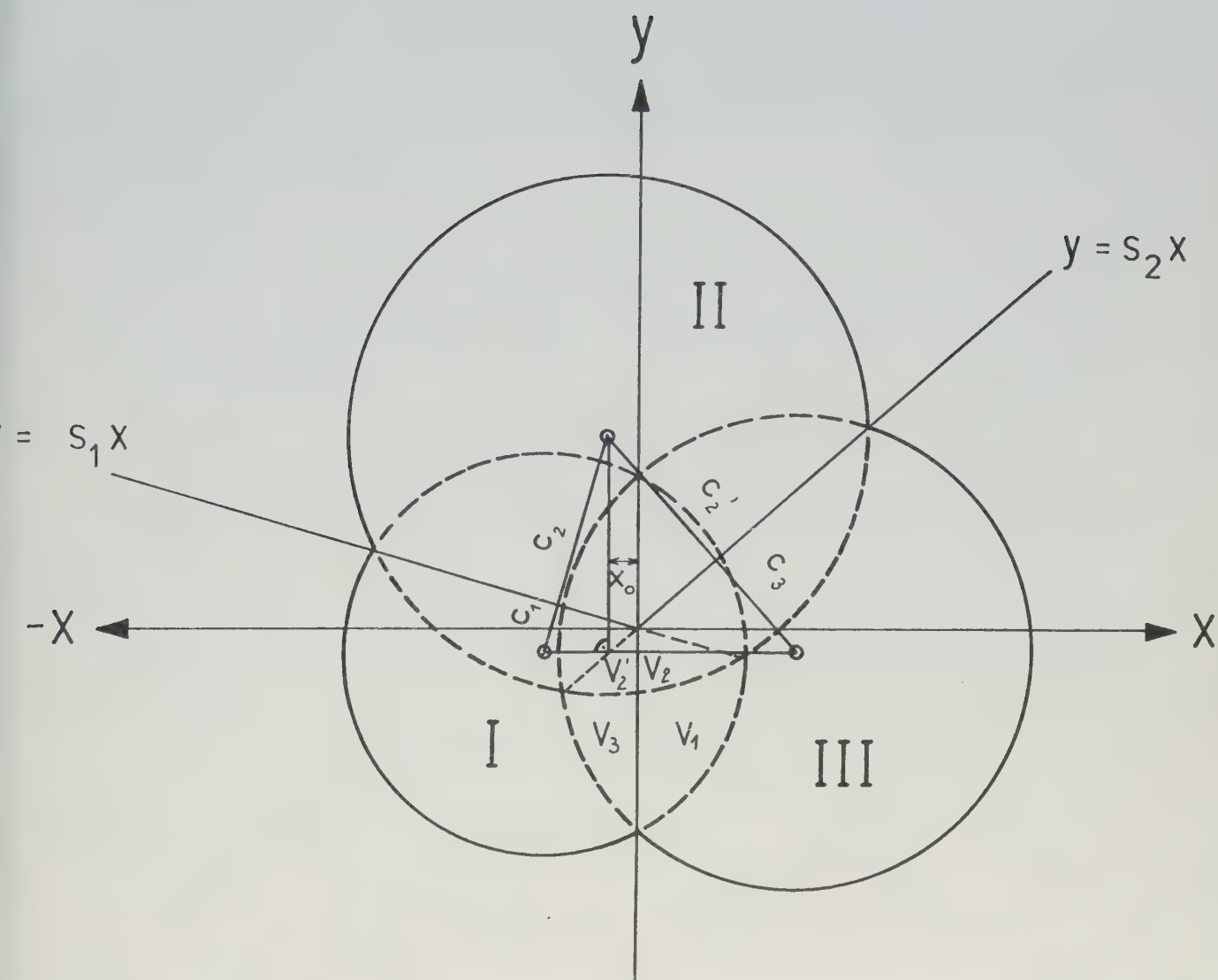


Abb. 31

Herrn Prof. Dr. W. Greiner bin ich zu großem Dank verpflichtet für die Anregung zu dieser Arbeit und sein Interesse an ihr. Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. Maruhn und Prof. Dr. Scheid, die mir immer zahlreiche Hilfen und Ratschläge gaben.

Darüber hinaus möchte ich meinen Kollegen im Institut danken, insbesondere den Herren J. Hahn und H.J. Lustig, die mir beim Formulieren dieser Arbeit geholfen haben. Ferner danke ich Frl. Roth und Frau Utschig für das Fertigstellen der Zeichnungen und Frau Pfister für das Tippen dieser Arbeit, sowie dem Zentralen Recheninstitut der Universität Frankfurt am Main und der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) für die zur Verfügung gestellte Rechenzeit.

Ein herzliches Dankeschön Herrn Brose für das Drucken der Arbeit.

Lebenslauf

Ich, Abdel Razik Degheidy, wurde am 18. Juli 1943 als Sohn von Awad Degheidy in Tulcha-Dakohlia/Ägypten geboren. Dort besuchte ich von 1949 bis 1954 die "Primary School". 1954 starb mein Vater. Von 1954 bis 1957 besuchte ich die "Preparatory School" und anschließend die "Secondary School" von 1957 bis 1960. Von 1960 bis 1964 habe ich am "Teachers College" in Kairo Physik, Chemie und Biologie studiert, von 1968 bis 1970 habe ich an der Naturwissenschaftlichen Fakultät der Ain Shams-Universität das Physikstudium absolviert.

1970 heiratete ich Fawkia El Ghannam; unsere beiden Kinder wurden 1972 und 1975 geboren. Von 1970 bis 1974 fertigte ich an der Ain Shams-Universität meine Diplomarbeit an. Seit 1974 bin ich am Institut für Theoretische Physik der Universität Frankfurt am Main bei Prof. Dr. W. Greiner, wo ich meine Dissertation anfertigte.

Meine akademischen Lehrer waren die Herren Professoren .
M. El Nadi, M. El Bedawi, J. El Kurdy, A. Geneid,
W. Greiner, W. Scheid, J. Maruhn und B. Müller.

